



**Universidad**  
Zaragoza

# Aislantes Topológicos

Trabajo de Fin de Grado

Autor

Víctor Barceló Rubio

Director

Dr. Manuel Asorey Caballeira

FACULTAD DE CIENCIAS  
2018

# Índice

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2. Sistemas topológicos bidimensionales</b>	<b>2</b>
2.1. Invariantes Topológicos . . . . .	4
2.2. Modelo de Haldane . . . . .	5
<b>3. El rol de la simetría</b>	<b>7</b>
3.1. Simetría de inversión temporal . . . . .	7
3.2. Simetría de inversión espacial (Paridad) . . . . .	10
<b>4. Efecto Hall cuántico de spin</b>	<b>10</b>
4.1. El modelo de Kane-Mele . . . . .	11
4.2. Invariante $\mathbb{Z}_2$ . . . . .	13
<b>5. Estados de borde y correspondencia Bulk-Edge</b>	<b>15</b>
5.1. Aparición de estados de borde . . . . .	15
5.2. Aproximación de baja energía entorno a los puntos de Dirac . . . . .	17
5.3. Correspondencia <i>Bulk Edge</i> . . . . .	18
<b>6. Aislantes topológicos</b>	<b>20</b>
6.1. Modelo de Bernevig-Hughes-Zahng . . . . .	20
6.2. Resultados experimentales . . . . .	23
<b>7. Conclusiones</b>	<b>24</b>
<b>Referencias</b>	<b>25</b>

# 1. Introducción

El rol de la topología en la física de materiales ha aumentado enormemente en los últimos años. Motivada por encontrar una explicación del descubrimiento de von Klitzig en 1980 del efecto Hall Cuántico (QHE) entero, su incursión ha dado lugar a numerosos descubrimientos teóricos en forma de nuevos estados de la materia, inexplicables fuera del contexto topológico, siendo algunos de ellos observados experimentalmente en los últimos años.

El QHE, descubierto en la capa de inversión de un Transistor de Efecto de Campo de Metal-Óxido (MOSFET), consiste en la cuantización de la conductividad Hall, que permanece constante en valores discretos a medida que se aumenta el campo magnético externo, múltiplos enteros de un cuanto de conductividad [1]. Éste fenómeno se explica mediante la cuantización de Landau, no mostrando dependencia alguna en la densidad de electrones móviles presentes en la muestra. Un año después de su descubrimiento, Laughlin muestra que esa cuantización puede derivarse a partir de la invarianza gauge, y que los estados de borde que aparecen en los extremos la muestra son una consecuencia directa de la cuantización[2]. A partir de estas consideraciones, Thouless *et al.* [3] obtienen la relación para la conductividad Hall considerando un modelo de respuesta lineal en un conductor bidimensional bajo un potencial periódico.

El concepto fundamental en la teoría de bandas topológica es la fase de Berry [4], factor de fase relacionado con el transporte adiabático dependiente de parámetros externos (p.e. un campo magnético aplicado). Al realizar una trayectoria cerrada en el espacio de parámetros del hamiltoniano, la función de onda de la partícula adquiere una fase debida únicamente a la trayectoria, de modo análogo al resultado de Aharanov y Bohm [5], que resulta ser una Holonomía[6]. Esto ha motivado la búsqueda de nueva física en sistemas con topologías no triviales, siendo hitos el modelo de Haldane [7] (Efecto Hall Cuántico Anómalo) y la publicación en 2005 de Kane y Mele [8] tratando un nuevo modelo (Efecto Hall Cuántico de Spin). En este último surgen nuevas ideas, como índices topológicos  $\mathbb{Z}_2$  o la relación con la simetría de inversión temporal.

Un aislante topológico se caracteriza por la presencia de estados de borde metálicos, relacionados directamente con la topología del sistema en el interior del material aislante. Éstos estados están protegidos por esa topología: su presencia unicamente depende del índice topológico que presente el interior del material, y son inmunes a pequeñas perturbaciones. Sistemas topológicos no triviales con el mismo índice son equivalentes.

El objetivo de este trabajo es presentar el fundamento teórico en el que se basan los aislantes topológicos, así como estudiar dos de los modelos de mayor relevancia histórica para este campo, el de Haldane [7] y el de Kane y Mele [8], haciendo énfasis en sus propiedades exóticas y su relación con la topología de la estructura de bandas. Finalmente se evaluará el descubrimiento teórico de Bernevig *et al.* [9] para el HgTe.

## 2. Sistemas topológicos bidimensionales

Un sólido cristalino es un material en el que sus átomos están dispuestos de manera periódica. Ésto hace que podamos definir una unidad espacial (celda unidad) cuya repetición en el espacio genera el sólido. Esta repetición, representada por un potencial periódico, genera soluciones de la ecuación de Schrödinger en forma de ondas de Bloch, siguiendo el teorema de Bloch-Floquet

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u(\mathbf{r}), \quad (2.1)$$

donde  $u(\mathbf{r})$  es una función periódica con la periodicidad de la red y  $\mathbf{k}$  el momento cristalino, que toma valores en la primera zona de Brillouin (PZB) del espacio recíproco. La PZB, posee la topología de un toro  $\mathbb{T}^d$  cuando se identifican sus caras opuestas y al que llamamos toro de Brillouin. Asociado a cada  $\mathbf{k}$ , como puede verse por (2.1), tenemos un *Hamiltoniano de Bloch*  $H(\mathbf{k})$  definido sobre un espacio de Hilbert de dimensión infinita,  $\mathcal{H}_k$ . Este conjunto de espacios  $\mathcal{H}_k$  forma un fibrado vectorial complejo sobre el toro de Brillouin,  $\pi : \mathcal{H}_k \rightarrow \mathbb{T}^d$ .

Las bandas de energía surgen de la disposición del gran número de átomos en el sólido, y representan los valores de la energía que puede tomar un electrón dentro de la red. Una banda llena no puede conducir electricidad. Por tanto, en un material aislante, existe un número de bandas de energía completamente llenas, estando el resto completamente vacías. La banda ocupada de mayor energía, banda de valencia, esta separada del primer nivel vacío por un gap de energía, encontrándose el nivel de Fermi entre ambas. Esta separación entre bandas llenas y vacías permite separar el fibrado de Bloch en dos, el fibrado de valencia y el fibrado de conducción. En un aislante topológico, el fibrado de Bloch completo es siempre trivial. Es la topología del fibrado de valencia y los niveles mas bajos del conductor la que caracteriza el estado topológico de un sistema.

Es el número de bandas ocupadas  $n$  la que nos determinará la dimensión del espacio de Hilbert *efectivo*, truncando el hamiltoniano de Bloch a  $n$  bandas ocupadas y  $n$  vacías, que estará representado por una matriz  $2n \times 2n$  y definido sobre el espacio  $\mathcal{H}_k \cong \mathbb{C}^{2n}$ . Por tanto, el caso mas simple, para  $n = 1$ , será un sistema de dos niveles, que represente una banda de valencia y otra de conducción. Ejemplos de este tipo son los modelos bidimensionales de Semenov [10] o el de Haldane [7]. En este último se reproduce el efecto Hall Cuántico Anómalo, análogo al efecto Hall Cuántico con la peculiaridad de no necesitar campo magnético externo para obtener una conductividad Hall no nula. Su hamiltoniano, en la representación sobre la esfera de Bloch, es

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} d_0(\mathbf{k}) + d_3(\mathbf{k}) & d_1(\mathbf{k}) - id_2(\mathbf{k}) \\ d_1(\mathbf{k}) + id_2(\mathbf{k}) & d_0(\mathbf{k}) - d_3(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (2.2)$$

y sus autoestados son  $\epsilon_{\pm} = d_0(\mathbf{k}) \pm |\vec{d}(\mathbf{k})| = d_0(\mathbf{k}) \pm (d_1^2(\mathbf{k}) + d_2^2(\mathbf{k}) + d_3^2(\mathbf{k}))^{1/2} = d_0(\mathbf{k}) \pm d(\mathbf{k})$ , representando la banda de valencia y la de conducción en cada caso. El nivel de Fermi se encuentra entre ambas bandas, y gap de energía es  $E_g = |d(\mathbf{k})|$ , siendo  $d_0(\mathbf{k})$  un desplazamiento global. El sistema permanecerá aislante mientras  $E_g \neq 0$ . El hecho de que  $E_g = 0$  es indicativo de que las bandas de energía se cruzan en algún punto  $\mathbf{k}$ , invirtiéndose. En ese punto de cruce aparecen estados metálicos. Los vectores propios del hamiltoniano, omitiendo la dependencia en  $(\mathbf{k})$  son (ver anexo A)

$$\psi_-(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2d(d-d_3)}} \begin{pmatrix} d_3 - d \\ d_1 + id_2 \end{pmatrix} \quad \psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2d(d+d_3)}} \begin{pmatrix} d_3 + d \\ d_1 + id_2 \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

Las cuatro  $d_i(\mathbf{k})$  del hamiltoniano (2.2) forman un mapa del toro de Brillouin en la esfera  $f : \mathbb{T}^2 \rightarrow \mathbb{S}^3$ . Sin embargo, al no aparecer  $d_0(\mathbf{k})$  en los autoestados, éstos forman un mapa sobre la esfera tridimensional  $f : \mathbb{T}^2 \rightarrow \mathbb{S}^2$ .

## Obstrucción para definir estados de manera continua

La presencia de puntos singulares en los vectores propios del hamiltoniano nos va a impedir definir estados de manera continua sobre todo el espacio de parámetros. Si observamos el límite en el que  $d_1(\mathbf{k})$  y  $d_2(\mathbf{k})$  se anulan, haciendo el cambio  $d_1 + id_2 = te^{i\varphi}$  y tomando el límite  $t \rightarrow 0$  vemos que (ver anexo B)

$$\begin{aligned} \psi_+ &\rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ e^{i\varphi} \end{pmatrix} & \psi_+ &\rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ & d_3 < 0 & & d_3 > 0, \end{aligned} \quad (2.4)$$

$$\begin{aligned} \psi_- &\rightarrow \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix} & \psi_- &\rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ e^{i\varphi} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

es decir, aparecen singularidades al definir el estado en ese límite: la fase  $\theta$  no está bien definida, ya que su dominio se reduce de un círculo de radio nulo (*i.e.* un punto). Consideremos ahora los autoestados del Hamiltoniano (2.2) parametrizados por el vector  $\vec{d}(\mathbf{k}) \in \mathbb{R}^3$ . Podemos introducir el vector unitario  $\vec{n} = \vec{n}(\mathbf{k}) = \vec{d}(\mathbf{k})/\epsilon_-$  (usamos el estado asociado a la banda de valencia, pero podemos usar el de conducción indistintamente), que describe un punto en una superficie esférica  $\mathbb{S}^2$ . En coordenadas esféricas, tenemos

$$\vec{n} = \begin{pmatrix} \text{sen } \theta \cos \varphi \\ \text{sen } \theta \text{sen } \varphi \\ \cos \theta \end{pmatrix} \quad \psi_-(\vec{n}) = \begin{pmatrix} -\text{sen } \frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

Esta esfera (de Bloch) conforma un espacio de parámetros, pero no podemos definir el autoestado (2.3) de manera continua en toda la esfera [11]. Esto es debido a la imposibilidad de definir un fibrado vectorial continuo que cubra toda la esfera, de manera similar al teorema de la bola peluda <sup>2</sup>, dejando ver la no trivialidad del fibrado  $\pi : \mathbb{C}^2 \rightarrow \mathbb{S}^2$  sobre la esfera, representado por el mapa en (2.5). Para describir un fibrado vectorial en la esfera necesitaremos dos trivializaciones locales [12, 11], una cubriéndola en una mitad,  $N$ , y otra por la otra mitad,  $S$ , de manera que tengan intersección no nula (ecuador). Definimos el autoestado de valencia a ambos lados del ecuador  $\theta = 0$ . El paso de una zona a otra en la intersección de ambas trivializaciones necesita de una función de transición  $t_{NS}$  que nos conecte ambos estados (2.4). Yendo de  $N$  a  $S$  tenemos

$$\psi_-^N(\vec{n}) = \begin{pmatrix} -e^{-i\varphi} \text{sen } \frac{\theta}{2} \\ \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad \psi_-^S(\vec{n}) = \begin{pmatrix} -\text{sen } \frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad t_{NS} = e^{i\varphi}, \quad (2.6)$$

<sup>2</sup>El teorema de la bola peluda estipula que un campo vectorial continuo definido sobre una esfera de dimensión par  $n$ , con  $n \geq 2$ , se anula en al menos un punto, es decir, no puede cubrir toda la esfera

es decir, el paso de una sección a otra del espacio de parámetros añade una fase  $\varphi$  a la función de onda en la transición para evitar la singularidad en  $\theta = 0$ . De manera análoga ocurre si consideramos el autoestado asociado a la banda de conducción.

## 2.1. Invariantes Topológicos

Como acabamos de ver, no podemos definir un campo vectorial (nuestros autoestados) de manera continua sobre la esfera. Esto puede generalizarse a cualquier variedad de parámetros, y como vamos a ver, caracterizarse mediante un invariante topológico.

Al considerar un sólido, el espacio de parámetros es el toro de Brillouin. Para estudiar sus puntos de singularidad de manera análoga, deberemos considerar el mapa del toro en la esfera, que es el que nos define la topología del sistema. Cuando un sólido posee topología no trivial, esta está caracterizada por un factor de fase no dinámico que surge en los autoestados del Hamiltoniano al recorrer adiabáticamente en un espacio de parámetros, una trayectoria cerrada [4]. Este espacio de parámetros puede estar conformado por diferentes magnitudes físicas, como un campo magnético, eléctrico, flujo, etc. Si tenemos un parámetro  $\lambda$  y no existe degeneración, la fase de Berry es

$$\gamma_n = i \oint_C \langle \psi(\lambda) | \frac{d}{d\lambda} | \psi(\lambda) \rangle d\lambda \quad (2.7)$$

Esta fase añade al sistema físico un grado de libertad con estructura  $U(1)$  mediante un factor  $e^{i\gamma_n}$  y es análoga al resultado obtenido en la experiencia de Aharonov y Bohm[5]. Ahí, la fase obtenida depende únicamente del flujo magnético encerrado por la trayectoria recorrida, y por tanto, del gauge escogido para el potencial electromagnético  $A_\mu$ . En el caso de Berry, la fase depende únicamente del cambio en los autoestados cuando se recorre una trayectoria cerrada en el espacio de parámetros. Por analogía, se define la conexión de Berry (o potencial gauge) como

$$\mathbf{A} = i \langle \psi | d | \psi \rangle, \quad (2.8)$$

donde  $d$  es la derivada exterior. Este  $\mathbf{A}$  resulta ser la conexión geométrica del fibrado  $U(1)$  sobre el la zona de Brillouin definido por los vectores propios del Hamiltoniano [6]. La conexión de Berry nos permite definir la derivada covariante en el espacio de autoestados [12], que nos permite realizar el transporte paralelo de los autoestados sobre el espacio de parámetros

$$\nabla_\mu \equiv \partial_\mu - iA_\mu \quad (2.9)$$

Esta derivada es la que desplaza al autoestado al avanzar en el espacio de parámetros. Al hacerlo en una trayectoria cerrada, si al completarla y volver al punto inicial el fibrado de Bloch no es trivial, nos descubrirá una fase no dinámica. A partir de esa conexión, se define la curvatura de Berry como  $F = dA$ , que es una propiedad intrínseca del conjunto de bandas de energía de un sistema<sup>3</sup>. Para un sistema de dos bandas como el considerado en (2.2), la conexión y la curvatura de Berry toman la forma (ver anexo C)

---

<sup>3</sup>Una magnitud dependiente del gauge, como  $\mathbf{A}$ , no puede representar nunca un observable físico, sin embargo,  $\gamma$  y  $F_{ij}$  si que son observables y pueden medirse [5, 13].

$$A_i(\mathbf{k}) = \frac{-1}{2d(d \pm d_3)}(d_2 \partial_i d_1 - d_1 \partial_i d_2) \quad F_{ij} = \frac{1}{2d^3} \epsilon_{abc} d_a \partial_i d_b \partial_j d_c \quad (2.10)$$

La topología de un sistema físico está definida por sus invariantes topológicos, propiedades que no varían bajo transformaciones continuas del Hamiltoniano. En un sistema bidimensional como el efecto Hall Cuántico, el invariante que caracteriza su topología es el primer número de Chern, un entero. Este invariante, que solo existe para sistemas bidimensionales, se obtiene a partir de la curvatura de Berry, y puede verse como el índice (*winding number*) del mapa  $h : \mathbb{T}^2 \rightarrow S^2$  del toro de Brillouin en la esfera: es el número de veces que los estados propios del Hamiltoniano, parametrizados por las  $d_i(\mathbf{k})$  cubren (completamente) la esfera de Bloch al recorrer el toro de Brillouin [11, 12]. Thouless, Kohmoto, Nightingale y den Nijs demostraron [3] que la conductividad Hall es directamente proporcional a este número, también llamado invariante TKNN, al que contribuye cada una de las bandas ocupadas

$$C = \frac{1}{2\pi} \int_S F_{ij} \quad \sigma_{xy} = \frac{e^2}{h} \sum_{\alpha} C_{\alpha} \quad \alpha \equiv \text{Bandas ocupadas}, \quad (2.11)$$

donde  $S$  es la superficie del espacio de parámetros, en nuestro caso el toro de Brillouin. Los materiales cuyas fases topológicas pueden caracterizarse por el número de Chern se denominan *aislantes de Chern*, y son el tipo más sencillo de aislante topológico.

## 2.2. Modelo de Haldane

Haldane [7] ideó un modelo en una red de grafeno (hexagonal) mediante el que reproducía el efecto Hall cuántico anómalo, es decir, sin campo magnético<sup>4</sup>. La red hexagonal no es una red Bravais, ya que está formada por dos subredes triangulares  $A$  y  $B$ , considerando en cada una de ellas un orbital atómico por punto. Su Hamiltoniano se obtiene a partir del método de *tight-binding*. Esta aproximación considera los electrones fuertemente enlazados a los núcleos, de manera que el Hamiltoniano del sólido en la vecindad de cada punto de la red puede considerarse como el de un solo átomo colocado en ese punto. Tomando el parámetro de red  $a = 1$  con los vectores de las subredes  $\mathbf{a}_i$  y  $\mathbf{b}_i$  (ver anexo D), el Hamiltoniano de Haldane es

$$H(\mathbf{k}) = \sum_i d_i(\mathbf{k}) \sigma_i \quad \begin{aligned} d_0(\mathbf{k}) &= 2t_2 \cos \phi \sum_{i=1}^3 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_i) \\ d_1(\mathbf{k}) &= t_1(1 + \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1) + \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2)) \\ d_2(\mathbf{k}) &= t_1(\sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1) + \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2)) \\ d_3(\mathbf{k}) &= M - 2t_2 \sin \phi \sum_{i=1}^3 \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_i) \end{aligned}, \quad (2.12)$$

siendo las  $\sigma_i$  las matrices de Pauli. Los términos  $t_1$  y  $t_2$  son términos cinéticos, que dan cuenta del salto de un electrón de un punto a un próximo vecino de diferente subred o de la misma, respectivamente.  $M$  equivale al potencial de cada punto.  $(M, \phi)$  son parámetros externos del modelo que podemos variar. El gap se cierra ( $|d(\mathbf{k})| = 0$ ) en los llamados puntos de Dirac, aquellos  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$  de la PZB para los que  $d_1(\mathbf{k})$  y  $d_2(\mathbf{k})$  se anulan, y en función de los parámetros, también  $d_3(\mathbf{k})$ . Sobre esos puntos, un cierre del gap implica  $|M| = 3\sqrt{3}t_2 \sin \phi$ ,

<sup>4</sup>Haldane consideró un campo magnético cuyo valor neto sobre la celda unidad fuera nulo. Esto rompía la simetría de inversión temporal y daba una fase de Aharonov-Bohm a un electrón que se moviera en la red [7, 11].

definiendo el diagrama de fases de la figura (2.1). Para la red hexagonal del grafeno, los puntos de Dirac se hallan fácilmente <sup>5</sup>.

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} \frac{4\pi}{3\sqrt{3}} \\ 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{K}' = -\mathbf{K} \quad (2.13)$$

Es en estos puntos donde aparecen las singularidades, como se ha visto en (2.4), siendo  $d_3(\mathbf{K}) = M - 3\sqrt{3}\sin\phi$  y  $d_3(\mathbf{K}') = M + 3\sqrt{3}\sin\phi$ . Las distintas fases del diagrama corresponden a topologías diferentes del fibrado de Bloch [13]. El número de Chern correspondiente a cada zona del diagrama de fases se obtiene calculando la curvatura de Berry como en (2.10) e integrando en el toro de Brillouin. Como en (2.4) y (2.6), el signo de  $d_3$  nos determina en que zona de la esfera de Bloch se encuentra el estado, es decir, sobre que trivialización ( $N$  o  $S$  en ese caso). El paso de una zona a otra implica la aparición de una fase no dinámica (2.6) y un cambio de signo en  $d_3(\mathbf{k})$ . Ese cambio de signo conlleva que en algún punto el gap se cierra, al pasar de una zona a otra del diagrama. El número de Chern puede definirse evaluando el signo de  $d_3(\mathbf{k})$  en cada punto de Dirac [7]

$$\sigma_{xy} = C = \frac{1}{2} [\text{signo}(d_3(\mathbf{K}')) - \text{signo}(d_3(\mathbf{K}))] \quad (2.14)$$

La comparación de los números de ocupación de ambas bandas en el caso trivial y en el topológico revela que difieren en el llenado completo de un nivel de Landau [7]. El número de Chern en un aislante topológico equivale a una conductividad Hall de base  $\sigma_{xy} = \pm e^2/h$ , independiente del campo magnético aplicado. Si consideramos la unión de dos aislantes con diferente  $C$  (con uno de los signos de  $d_3(\mathbf{k})$  diferente en los puntos de Dirac) y los unimos, su continuidad hace que en la interfase se crucen las bandas de energía y aparezcan estados de borde metálicos análogos a los del efecto Hall cuántico.

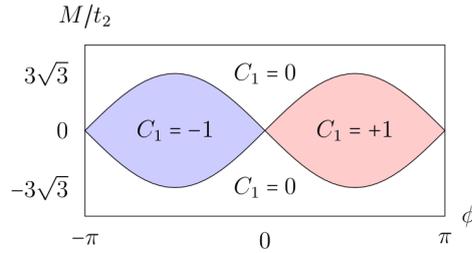


Figura 2.1: Diagrama de fases de Haldane. Las zonas donde  $C \neq 0$  indican topología no trivial del sistema (figura Ref. [11]).

Aislantes topológicos con números de Chern mayores surgen cuando consideramos interacciones segundos, terceros vecinos, etcétera, añadiendo sus correspondientes términos cinéticos al modelo [11].

## Invariante $C$

El primer número de Chern  $C$  representa una clase característica asociada al fibrado de Bloch [12]. Es una cantidad topológica en el sentido de que no varía bajo transformaciones

<sup>5</sup>Tenemos en realidad seis puntos en los que se puede cerrar el gap, uno en cada esquina de la celda Wigner-Seitz de la red recíproca, pero solo dos son inequivalentes en el toro: los vértices de la PZB que entran en el paralelogramo formado por  $b_1$  y  $b_2$ .

continuas del Hamiltoniano. Solo una transición de fase asociada con un cierre del gap puede cambiar la topología del sistema, tal y como indica (2.14). El número  $C$  es el índice (*winding number*) del mapa del toro en la esfera, es decir, el número de veces que este (definido por las  $d_i(\mathbf{k})$ ) cubre la esfera a medida que  $\mathbf{k}$  recorre el toro completamente. La fase de Berry (2.7) surge de recorrer un ciclo cerrado en el espacio de parámetros. Esto hace que cualquier transformación de gauge local  $U(1)$  deje invariante esa fase excepto aquellas que añadan un factor  $2\pi C$  [12]. Concretamente, considerando las trivializaciones en (2.6),  $C$  se define como el índice de la función de transición en el ecuador de la esfera [12, 11]. En caso de que la función de transición pueda deformarse en la identidad indica que podemos definir los autoestados en todo el toro de Brillouin y  $C = 0$ . Si no es posible, el fibrado es no trivial y necesitamos realizar las dos trivializaciones y  $C \neq 0$ . Este último caso puede verse como una obstrucción al teorema de Stokes, ya que la integral sobre el toro de la curvatura de Berry (2.11) sería cero por ser esta una superficie cerrada [12].

### 3. El rol de la simetría

En un sistema físico, una simetría es una propiedad que no varía bajo transformaciones. La gran mayoría de fenómenos físicos se deben a la ruptura de alguna simetría. Por ejemplo, la existencia de un momento dipolar eléctrico no nulo rompe tanto la simetría de inversión temporal como la espacial. En el modelo de Haldane, es la ruptura de esas simetrías la responsable de la aparición de una conductividad Hall no nula independiente del campo magnético aplicado [7]: el término  $M$  rompe la simetría de inversión, y el término  $t_2$  rompe la simetría de inversión temporal, ya que contabiliza el efecto del flujo magnético sobre la celda hexagonal. En ese modelo, el efecto efecto Hall cuántico se produce por esa ruptura de simetría. En el estudio de los aislantes topológicos, a partir de la publicación de Kane y Mele sobre el efecto Hall cuántico de spin [8], se abre la puerta a nuevos modelos donde la presencia de esa simetría no solo no hace trivial la topología del sistema, sino que es la responsable de las diferentes fases topológicas, caracterizadas por un índice  $\mathbb{Z}_2$ . Debido a que la única condición es la presencia de la simetría temporal, este tipo de aislantes topológicos pueden extenderse a las tres dimensiones [14].

#### 3.1. Simetría de inversión temporal

La inversión temporal es la transformación  $T : t \rightarrow -t$ , siendo  $T$  el operador de inversión temporal. La aplicación de este operador sobre un fibrado de Bloch relaciona las fibras en  $k$  con las fibras en  $-k$ . Si un sistema presenta esta simetría, el Hamiltoniano conmuta con  $T$  y satisface

$$H(-k) = T H(k) T^{-1} \quad (3.1)$$

Al hacer la transformación  $t \rightarrow -t$ , una solución genérica de la ecuación de Schrödinger transforma como  $\psi(t) \rightarrow \psi(-t)$  y deja de ser solución. Sin embargo,  $\psi^*(-t)$  sí que lo es. Por tanto, la inversión temporal equivale a resolver la ecuación de Schrödinger conjugada. Con este dato, y utilizando las propiedades de los armónicos esféricos <sup>6</sup>, la acción del operador  $T$

---

<sup>6</sup>Los armónicos esféricos conjugados cumplen  $Y_\ell^{m*}(\theta, \varphi) = (-1)^m Y_\ell^{-m}(\theta, \varphi)$

sobre un autoestado  $|j, m\rangle$  es de la forma[15]

$$\mathbb{T} |j, m\rangle = (-1)^m |j, -m\rangle \quad (3.2)$$

Para sistemas de spin entero, el sistema es involutivo  $\mathbb{T}^2 = 1$ , siendo  $\mathbb{T} = \mathcal{K}$  la conjugación compleja. Nos centraremos en sistemas de spin semientero, donde  $\mathbb{T}^2 = -1$  con  $\mathbb{T} = \exp(-i\pi J_y / \hbar) \mathcal{K}$  [15]. Tomando una base de autoestados de  $J_y$ , es inmediato:

$$\mathbb{T} = e^{-i\pi J_y / \hbar} \mathcal{K} = \begin{pmatrix} e^{-i\pi m - J} & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & e^{i\pi m, J} \end{pmatrix} \mathcal{K} \quad (3.3)$$

Para el caso particular de  $J = 1/2$ , este operador queda

$$\mathbb{T}_{1/2} = \begin{pmatrix} e^{-i\pi/2} & 0 \\ 0 & e^{i\pi/2} \end{pmatrix} \mathcal{K} = \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} \mathcal{K} = -i s_2 \mathcal{K}, \quad (3.4)$$

donde  $s_2$  es la matriz de Pauli  $\sigma_2$  en su base de vectores propios. Como  $\mathbb{T}$  covaría con  $s_2$ , esa expresión es la misma sea cual sea la base del espacio de spin, pudiendo cambiar a la base habitual de autoestados de  $\sigma_3$ , quedando

$$\mathbb{T}_{1/2} = -i \sigma_2 \mathcal{K}, \quad (3.5)$$

que cumple  $\mathbb{T}_{1/2}^2 = -1$ : es una rotación  $2\pi$  en el espacio de spin. Puede comprobarse aplicando una rotación

$$\mathbb{R}_z(\theta) = e^{i\sigma_3 \theta / 2} = \cos \frac{\theta}{2} + i \sigma_3 \sin \frac{\theta}{2} \quad \rightarrow \quad \mathbb{R}_z(2\pi) = -1 \quad (3.6)$$

Por tanto, la aplicación del operador  $\mathbb{T}_{1/2}$  equivale a un giro  $\pi$  en el espacio de spines.

### Degeneración de Kramers

$\mathbb{T}$  conforma un mapa de la fibra en  $k$  a la fibra en  $-k$ : la imagen de un autoestado de  $H(\mathbf{k})$  en  $\mathbf{k}$  por  $\mathbb{T}$  es un autoestado de  $H(-\mathbf{k})$  en  $-\mathbf{k}$ , con la misma energía. Sin embargo, este par de vectores no representan el mismo estado: en caso de que lo hicieran, diferirían únicamente en una fase y por tanto

$$\mathbb{T} |\psi\rangle = e^{i\varphi} |\psi\rangle \quad \mathbb{T}^2 |\psi\rangle = \mathbb{T} e^{i\varphi} |\psi\rangle = e^{-i\varphi} e^{i\varphi} |\psi\rangle = +|\psi\rangle, \quad (3.7)$$

contradiendo así el carácter anti-involutivo de  $\mathbb{T}$  para estados de spin semientero,  $\mathbb{T}^2 = -1$ . La única explicación posible es que  $|\psi\rangle$  y  $\mathbb{T} |\psi\rangle$  representen estados diferentes asociados a la misma energía[15]. Este resultado es el teorema de Kramers: los niveles de energía de un sistema con simetría  $\mathbb{T}$  de spin semientero son, como mínimo, doblemente degenerados en ausencia de un campo magnético[8]. En el caso de spin total  $1/2$  la degeneración es doble. A cada par de estados relacionados por  $\mathbb{T}$  se les denomina pares de Kramers. El carácter anti-involutivo de  $\mathbb{T}$ , mostrado en la relación  $\mathbb{T}^2 = -1$ , implica que estos pares de estados son ortogonales entre si. Esta degeneración puede verse en sistemas con un número impar de electrones mediante efecto Zeeman, al aplicar un campo magnético[15].

En general, los pares de Kramers pertenecen a fibras diferentes del fibrado de Bloch. Sin embargo, la periodicidad de la red hace que existan varios puntos en toro de Brillouin en los que ambos estados pertenecen a la misma fibra, aquellos en los que  $k$  y  $-k$  son idénticos en el toro. Éstos puntos, llamados TRIM (Time Reversal Invariant Momenta) o puntos de alta simetría, pueden obtenerse identificando los ejes opuestos de la celda primitiva del espacio recíproco: son los que difieren entre si en una distancia de un vector  $\mathbf{G}$  de la red, es decir,  $\mathbf{k} = \mathbf{G}/2$ . En un sistema bidimensional, existen cuatro TRIM distintos, ya que la dimensión de la base del espacio recíproco es dos. Del mismo modo, en tres dimensiones, ocho. En cada uno de estos puntos, ambos estados de un par de Kramers pertenecen a la misma fibra, es decir, al mismo  $H(\mathbf{k})$ . Como son ortogonales y poseen la misma energía, en estos puntos el espectro es siempre degenerado[11].

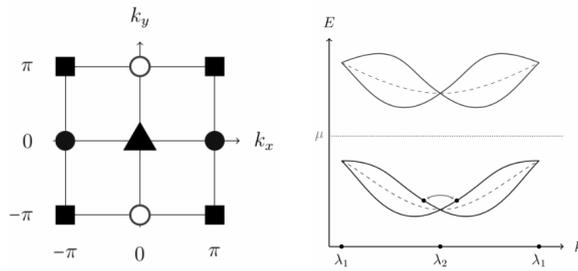


Figura 3.1: Puntos de la celda primitiva invariantes bajo inversión temporal, para una red cuadrada (izquierda) y degeneración de Kramers para un sistema de dos bandas (derecha). (Figuras Ref. [11])

### Zona de Brillouin Efectiva (EBZ)

Debido a la aparición de pares de Kramers, la descripción de un sistema temporalmente simétrico resulta redundante en la mitad del toro de Brillouin, donde los TRIM se encuentran sobre la frontera, compartida por ambas mitades. De esta forma, mantenemos únicamente uno de los estados de cada par de Kramers, excepto en la frontera. Esta mitad del toro de Brillouin es la *zona de Brillouin efectiva*[8].

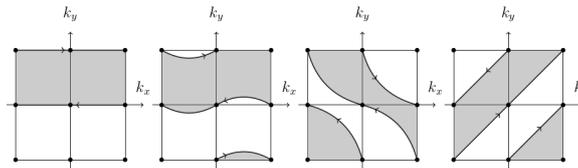


Figura 3.2: Ejemplos de zonas de Brillouin efectivas (figura Ref. [11]).

### Consecuencias de la simetría T

La simetría de inversión temporal hace que el estado del sistema no pueda caracterizarse por el número de Chern: la curvatura de Berry resulta una función impar  $F_{ij}(-\mathbf{k}) = -F_{ij}(\mathbf{k})$ , anulándose su integral sobre el toro de Brillouin (y por tanto, la conductividad Hall)[9]. Esto puede verse aplicando la definición de la curvatura de Berry

$$F_{ij} = \partial_i A_j - \partial_j A_i, \quad (3.8)$$

obteniendo  $A$  usando la actuación de  $T$  sobre los autoestados. En Haldane, si  $t_2 \sin \phi = 0$ , el sistema tiene simetría de inversión temporal, ambas masas  $d(\mathbf{K})$  y  $d(\mathbf{K}')$  tienen igual signo y el número de Chern (2.14) se anula. Sin embargo, que el número de Chern se anule no implica que la topología del fibrado de Bloch sea trivial si  $T$  es una simetría.

Además de esto, la invarianza temporal identifica dos subespacios dentro del fibrado de valencia [8]: un subespacio *par* en el que  $[H(\mathbf{k}), T] = 0$  y los autoestados del Hamiltoniano de Bloch  $|u_i(\mathbf{k})\rangle$  y  $T|u_i(\mathbf{k})\rangle$  son equivalentes mediante una rotación  $U(2)$ , y uno *impar* en el que los autoestados  $|u_i(\mathbf{k})\rangle$  y  $T|u_i(\mathbf{k})\rangle$  respectivamente son ortogonales. En los TRIM, los autoestados del Hamiltoniano del sistema se encuentran en el espacio par, pues  $H(\mathbf{k}) = H(-\mathbf{k})$ . La identificación de estos subespacios será importante a la hora de definir el índice topológico  $\mathbb{Z}_2$ , ya que es el estudio del conjunto de los  $\mathbf{k}$  que pertenecen al espacio impar el que establecerá la clasificación.

### 3.2. Simetría de inversión espacial (Paridad)

La paridad, o inversión espacial, es el operador unitario  $\mathcal{P}$  encargado de invertir las coordenadas espaciales. Actúa de la forma

$$\mathcal{P}|\mathbf{r}, s_z\rangle = |-\mathbf{r}, s_z\rangle, \quad (3.9)$$

y aplicarlo dos veces devuelve el sistema a la configuración inicial, es decir  $\mathcal{P}^2 = 1$ , siendo sus autovalores  $\pm 1$ . En una red hexagonal, la acción de este operador deja invariante la red, pero intercambia las subredes triangulares  $A$  y  $B$  sobre las que se define el modelo de Haldane. Por tanto, en la base de subredes  $(A, B)$ , el operador paridad de un sistema de dos bandas en una red hexagonal será  $P = \sigma_x$ . En ese modelo, el parámetro  $M$  rompe esta simetría. Otros modelos, como el de Bernevig *et al.* [9], consideran una base de orbitales  $s$  y  $p$ , en los que el operador paridad es diagonal, debido a su diferente paridad. Cuando esta simetría está presente, se cumple  $\mathcal{P}H(\mathbf{k})\mathcal{P}^{-1} = H(-\mathbf{k})$ . La presencia de esta simetría junto a  $T$  hace que los únicos puntos en los que pueda cerrarse y reabrirse el gap sean los TRIM[13]. Las bandas en un sistema tal serán siempre doblemente degeneradas debido al spin. Si ambas simetrías están presentes

$$[H(\mathbf{k}), \mathcal{P}T] = 0, \quad (3.10)$$

y cada autoestado  $|\psi\rangle$  del hamiltoniano viene acompañado por otro ortogonal y degenerado  $\mathcal{P}T|\psi\rangle$ . El mínimo sistema que conserve  $\mathcal{P}T$  tendrá un Hamiltoniano  $4 \times 4$ , expandible en términos de matrices que cumplan el álgebra de Clifford[11].

## 4. Efecto Hall cuántico de spin

La interacción spin-órbita  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$  es el acoplo entre el momento angular del electrón  $\mathbf{L}$  y su spin  $\mathbf{S}$ . Esta perturbación es pequeña como para alterar demasiado la estructura de bandas de energía, pero puede influir en aquellas cercanas al nivel de Fermi, lo que nos permite considerar un Hamiltoniano dos bandas como (2.2). El modelo propuesto por Kane y Mele fue introducido como una variante del modelo de Haldane en la que la topología no trivial surge de la simetría de inversión temporal, conservada por el término spin-órbita [8]. El

resultado son dos copias del modelo de Haldane en las que las corrientes de los bordes no son de carga, sino de spin. Por ello, este efecto se denomina efecto Hall Cuántico de Spin. En este modelo, se conserva tanto la simetría espacial como la temporal.

#### 4.1. El modelo de Kane-Mele

Debido a la degeneración de spin, las dos bandas se duplican de (2.2) se desdoblan, quedando dos llenas y dos vacías. Tomaremos la base del modelo de Haldane en dos dimensiones e incluiremos el grado de libertad del spin: aquí el papel del término de salto  $t_2$  que contabiliza el efecto del flujo magnético a través de la celda lo realiza un término de spin órbita  $\lambda_{SO}$ . El modelo mas simple impone la simetría  $\mathcal{PT}$ , y su Hamiltoniano es

$$H(\mathbf{k}) = d_0(\mathbf{k})I + d_1(\mathbf{k})\gamma_1 + d_2(\mathbf{k})\gamma_2 + d_3(\mathbf{k})\gamma_3, \quad (4.1)$$

donde las matrices  $\gamma_i$  son producto tensorial de matrices de Pauli de spin y de subred. En la base  $(A \uparrow, A \downarrow, B \uparrow, B \downarrow)$  estas son:

$$\gamma_1 = \mathcal{P} = \sigma_1 \otimes I \quad \gamma_2 = \sigma_2 \otimes I \quad \gamma_3 = \sigma_3 \otimes s_3, \quad (4.2)$$

donde reconocemos en  $\gamma_1$  el operador paridad, que actúa en el subespacio de subredes. En la misma base, el operador de inversión temporal es  $T = i(I \otimes s_2)\mathcal{K}$ . El tercer término del Hamiltoniano (4.1) da cuenta del acoplo spin-órbita. El método de tight-binding lleva a unas funciones  $d_i(\mathbf{k})$  del Hamiltoniano tales que [16]:

$$\begin{aligned} d_0(\mathbf{k}) &= 0 \\ d_1(\mathbf{k}) &= t(1 + \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1) + \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2)) \\ d_2(\mathbf{k}) &= t(\sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1) + \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2)) \\ d_3(\mathbf{k}) &= 2\lambda_{(SO)}(\sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1) - \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2) - \sin(\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2))) \end{aligned} \quad (4.3)$$

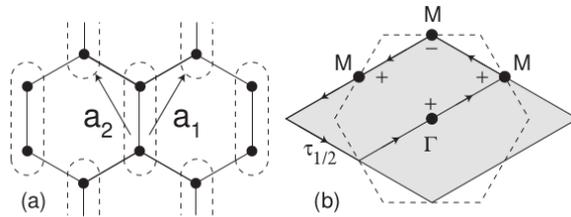


Figura 4.1: (a) Vectores de la base para el modelo de Kane Mele. (b) Primera Zona de Brillouin. (Figura Ref. [16])

Los autovalores del (4.1) son  $\epsilon_{\pm}(\mathbf{k}) = d_0(\mathbf{k}) \pm d(\mathbf{k}) = d_0(\mathbf{k}) \pm \sqrt{d_1^2(\mathbf{k}) + d_2^2(\mathbf{k}) + d_3^2(\mathbf{k})}$  y los autoestados asociados se obtienen fácilmente, considerando cada subespacio de spin como un modelo de dos bandas análogo a (2.2). Por comodidad nos centramos en los estados de las bandas ocupadas. Tenemos, para cada estado de spin normalizado, los siguientes vectores propios

$$|\psi_{-, \downarrow}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2d(d+d_3)}} \begin{pmatrix} 0 \\ -d_3 - d \\ 0 \\ d_1 + id_2 \end{pmatrix} \quad |\psi_{-, \uparrow}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2d(d-d_3)}} \begin{pmatrix} d_3 - d \\ 0 \\ d_1 + id_2 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

Es fácil comprobar, aplicando T, que estos autoestados forman pares de Kramers. La topología del sistema se deja ver en el límite  $d_1 = d_2 = 0$ , del mismo modo que en (2.4), donde puede cerrarse el gap. Si pasamos a polares  $d_1 + id_2 = te^{i\theta}$  y hacemos  $t \rightarrow 0$  aparecen las singularidades: no podemos definir el par de autoestados en todo el toro de Brillouin. Considerando los vectores propios de las bandas ocupadas, tenemos (ver anexo A)

$$\begin{aligned} |\psi_{-, \downarrow}\rangle &\rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} & |\psi_{-, \uparrow}\rangle &\rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ e^{i\theta} \\ 0 \end{pmatrix} & d_3 > 0 \\ |\psi_{-, \downarrow}\rangle &\rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ e^{i\theta} \end{pmatrix} & |\psi_{-, \uparrow}\rangle &\rightarrow \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} & d_3 < 0, \end{aligned}$$

por tanto, la fase  $\theta$  en  $t = 0$  no está bien definida (y uno de los estados tampoco). En los TRIM ( $\lambda_i \in \Lambda$ ), los momentos  $\mathbf{k}$  y  $-\mathbf{k}$  son equivalentes y los autoestados (4.4) pertenecen a la misma fibra  $H(\mathbf{k}) = H(-\mathbf{k})$ . Por tanto, la invarianza bajo inversión temporal hace que las funciones  $d_{i>1}$  se anulen (ya que son impares en  $\mathbf{k}$ ), dejando únicamente el término  $d_1(\mathbf{k})$  asociado a operador paridad del sistema  $\gamma_1$ . La energía de la banda es  $\epsilon_- = -d_1(\mathbf{k})$ : mientras no se anule  $d_1$ , el sistema permanece aislante. Si  $d_1$  cambia de signo en alguno de los TRIM ( $\lambda$ ) manteniendo nulos  $d_2$  y  $d_3$ , y dado que  $H(\mathbf{k})$  es continuo en  $\mathbf{k}$ , en ese punto  $d_1(\lambda) = 0$  y el gap se cierra.

Consideremos ahora las singularidades encontradas al hacer  $d_1(\mathbf{k}) = d_2(\mathbf{k}) = 0$ . Esos puntos poseen vorticidades opuestas para cada elemento del par de Kramers [11]. Si podemos transformar el Hamiltoniano de manera continua para que se aniquilen, las singularidades desaparecen y el sistema es trivial. En caso contrario, no podremos definir los autoestados en todo el toro. Se observa fácilmente al considerar un único par de autoestados: la única manera de se aniquilen es pasar por el punto  $\lambda$  (pues la simetría ha impuesto que  $d_2(\lambda) = 0$ ), donde  $d_3(\lambda) = 0$ . Ahí los estados de Kramers no están bien definidos y la única manera de que se aniquilen es cerrando el gap. Sin embargo, dos pares de Kramers hace que podamos aniquilar los vórtices de uno de los pares con los del otro, de modo que se pueda definir  $d_1(\mathbf{k})$  de manera que no cambie de signo en todo el toro de Brillouin. Por ello, trazar el signo de los  $d_1(\lambda_i)$  nos dirá si podemos eliminar las singularidades. Con  $\delta_i$  el autovalor de la paridad<sup>7</sup> en el punto  $\lambda_i$ , la cantidad

<sup>7</sup>Como la energía de la banda ocupada es negativa, el autovalor de la paridad es el opuesto al del  $\text{sign}[d_1(\lambda_i)]$ , ya que  $\epsilon_-(\lambda_i)|\psi\rangle = d_1(\lambda_i)\gamma_1|\psi\rangle = d_1(\lambda_i)\xi(\lambda_i)|\psi\rangle$ .

$$I = \prod_{\lambda_i \in \Lambda} \text{sign}[d_1(\lambda_i)] = \prod_{\lambda_i \in \Lambda} \xi_i, \quad (4.5)$$

indica si  $d_1$  cambia de signo un número par (+1) o impar (-1) de veces al recorrer todo el toro de Brillouin: es el número de pares de soluciones al sistema  $(d_1(\mathbf{k}) = 0, d_2(\mathbf{k}) = 0)$  presentes en la zona de Brillouin, los puntos de Dirac. Si es +1, el sistema es trivial y los vórtices pueden aniquilarse; si es -1, los vórtices se aniquilan hasta que queda un único par que solo pueden cancelarse en un TRIM. Si esto ocurre, el sistema es topológico[8].

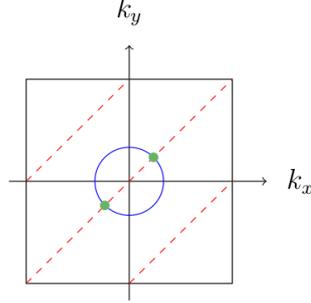


Figura 4.2: Ejemplo de líneas con  $d_1 = d_2 = 0$  en el caso topológico, cuando  $d_1 < 0$  siempre en el origen. Línea continua representa  $d_1$ , discontinua  $d_2$ , donde se cruzan, aparecen singularidades para definir los pares de Kramers.(figura Ref. [11])

## 4.2. Invariante $\mathbb{Z}_2$

La expresión más general de ese invariante viene dada en función del Pfaffiano de los elementos de matriz del operador T. Esta cantidad traza la ortogonalidad de los pares de Kramers y nos permite dar una definición del índice topológico. Los elementos de matriz del operador de inversión temporal son

$$m_{ij}(\mathbf{k}) = \langle u_i(\mathbf{k}) | T | u_j(\mathbf{k}) \rangle, \quad (4.6)$$

siendo los  $|u_i(\mathbf{k})\rangle$  una base global del fibrado de valencia. El Pfaffiano de esta matriz está siempre definido: el número de bandas llenas que compone el fibrado es par, y la ortogonalidad de un estado con su simétrico por T implica la antisimetría de  $m$ . La magnitud  $|\text{Pf}[m]|$ , en el espacio par (ver sección 3.1), cumple  $|\text{Pf}[m]| = 1$ , mientras que en el subespacio impar,  $|\text{Pf}[m]| = 0$  [8]. El Pfaffiano no es invariante gauge: una transformación  $U(2)$  tal que  $|u'_i\rangle = U_{ij}|u_j\rangle$  transforma tal que  $\text{Pf}' = \text{Pf} \det U$ , y bajo una transformación  $U(1) : U = e^{i\theta}$ , adquiere un factor de fase  $e^{2i\theta}$ . Por tanto, su valor absoluto si es invariante gauge. El número de pares de ceros complejos<sup>8</sup> del Pfaffiano es un invariante topológico[8, 11]. Dos pares de ceros, en los puntos  $\pm(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$  pueden aniquilarse entre sí, mediante una deformación continua del hamiltoniano, cuando  $\mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_2$  (figura 4.3). Si existe un solo par de ceros del Pfaffiano, en  $\pm\mathbf{k}$ , deberán cruzarse en uno de los  $\lambda_i$ . En esos puntos, los autoestados pertenecen al subespacio par y  $|\text{Pf}[m]| = 1$ . Este invariante se puede obtener como el *winding number*

<sup>8</sup>Los ceros del Pfaffiano son vórtices con vorticidad  $\pm 1$ , siendo esta el grado de una curva cerrada  $\Gamma : \mathbb{S}^1 \rightarrow \mathbb{C} \setminus \{a\}$  en el plano complejo entorno a los ceros  $a$  y una función  $f(z) \ni z \in \Gamma$ , dado por  $\text{deg}(f(\Gamma), a) = 1/2\pi i \int_{\Gamma} d \log(f(z) - a)$ .

de la fase de  $\text{Pf}[m]$  en un ciclo cerrado sobre la frontera de la zona de Brillouin efectiva [8]

$$\nu = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\partial EBZ} d \log \text{Pf}[m] \quad \text{mód } 2, \quad (4.7)$$

y puede tomar el valor 1 o 0. En esta última expresión estamos sumando las vorticidades en todos los puntos  $\mathbf{k}$  donde existan singularidades. Debido a que en su definición únicamente se usan las propiedades de los pares de Kramers, el único requerimiento para definir este índice es la existencia de simetría de inversión temporal. En caso de romperse la simetría, no existen los puntos  $\lambda_i$  y los ceros del Pfaffiano pueden cancelarse sin problema.

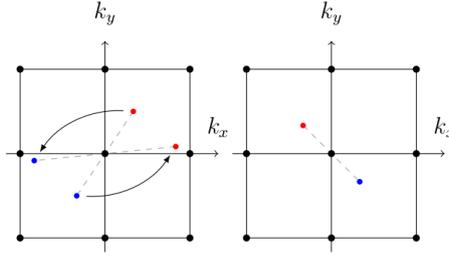


Figura 4.3: Vórtices (ceros) del Pfaffiano en el caso trivial (izquierda) y topológico(derecha)(Figura de ref.[11]).

El Pfaffiano de la matriz  $m$  construida con los autovectores (4.4) del modelo de Kane y Mele es

$$\text{Pf}(m) = \frac{d_1(d_1 + id_2)}{\sqrt{(d_1^2 + d_2^2)(d_1^2 + d_2^2 + d_3^2)}}, \quad (4.8)$$

donde los ceros de esta función se encuentran en los puntos donde  $d_1 = d_2 = 0$ , que son los mismos puntos donde surgen las singularidades obtenidas en (4.1) y (4.1).

En [17] se define el invariante  $\nu$  de una manera mas general y sencilla a partir de la curvatura de Berry. Esta expresión, análoga a (4.7), es la siguiente

$$(-1)^\nu = \prod_{\lambda_i \in \Lambda} \frac{\text{Pf}(w(\lambda_i))}{\sqrt{\det w(\lambda_i)}} = \prod_{\lambda_i \in \Lambda} \delta_i \quad \Lambda \equiv \text{TRIM}, \quad (4.9)$$

donde la matriz  $w$  se define como  $w_{ij}(\mathbf{k}) = \langle u_{i,-\mathbf{k}} | T | u_{j,\mathbf{k}} \rangle$ . Esta matriz es antisimétrica únicamente en los puntos  $\lambda_i$  y por tanto su Pfaffiano está únicamente definido en esos puntos. Esto supone una simplificación en la obtención de  $\nu$  y facilita su extensión a sistemas tridimensionales. Además, si el sistema es simétrico bajo  $\mathcal{PT}$ , se reduce al producto de los autovalores de paridad (ver anexo F)

$$\nu = \prod_{\lambda \in \Lambda} \xi(\lambda_i), \quad (4.10)$$

que es la misma expresión obtenida en (4.5). Este índice se interpreta como una obstrucción a definir pares de Kramers en todo el toro de Brillouin, y como el número de Chern, puede verse como una obstrucción a aplicar el teorema de Stokes [17]. La diferencia con  $C$  radica en que en el caso de  $\nu$  la obstrucción es a una transformación  $SU(2)$  mientras que en el número de Chern lo es a  $U(1)$  [11, 17].

## 5. Estados de borde y correspondencia Bulk-Edge

La aparición de estados de borde es una de las principales características de un aislante topológico, cuando consideramos un sistema finito: el material es aislante en su interior<sup>9</sup> pero en sus bordes (*i.e.*, contacto con un material de diferente topología) se comporta como un metal. En el efecto Hall Cuántico Entero ya aparecen estos estados de borde: desde el punto de vista de la cuantización de Landau, los electrones cercanos en los extremos de la muestra no pueden realizar órbitas completas, pero el campo magnético, debido a la fuerza de Lorentz, les obliga a conservar el momento angular. Esto resulta en el *rebote* de los electrones contra el extremo de la muestra y en un desplazamiento neto a lo largo del borde (una corriente) restringido a una dirección determinada (quiral). En el otro extremo de la muestra, la intensidad circula en la dirección contraria. Estos estados son insensibles al desorden y a la inhomogeneidad de la muestra pues no hay estados disponibles para que cambien su dirección de propagación. La quiralidad opuesta de estos estados puede derivarse del teorema de Nielsen-Ninomiya[18]. Este indica que el número de estados de borde en un sistema debe ser par, y el número de estados con quiralidades opuestas debe ser el mismo. La topología del sistema protege éstos estados de borde frente a perturbaciones [13, 19], y solo pueden aparecer o desaparecer si cambia la topología de la estructura de bandas del interior.

### 5.1. Aparición de estados de borde

La relación entre los estados de borde y la conductividad Hall la demostró Laughlin en el efecto Hall cuántico [2]: éstos son una consecuencia directa de la cuantización de la conductividad. Se va a seguir un procedimiento similar al suyo para obtener esa relación.

Consideremos un material bidimensional con un campo magnético  $B$  perpendicular a él, con periodicidad en la coordenada  $y$  y finito en  $x$ . La muestra en la coordenada  $x$  puede modelarse como un pozo de potencial infinito donde las funciones de onda se anulan en los extremos. Con estas condiciones de contorno, los niveles de Landau pueden aproximarse como en la figura 5.1. La periodicidad en  $y$  nos permite tomar el sistema como un cilindro, con circunferencia  $L_y$  (espaciado de la red en esa dimensión), con el campo magnético aplicado saliendo hacia afuera. La red recíproca es también un cilindro, con circunferencia  $2\pi/L_y$ . Existe, además, una diferencia de potencial  $\Delta V$  entre los bordes del cilindro<sup>10</sup>. Esta situación es el efecto Hall [1]. El Hamiltoniano del sistema es

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_c^2 \left( x - \frac{\hbar k_y}{m\omega_c} \right)^2 \quad (5.1)$$

Esta cuantización de Landau nos da una relación de proporcionalidad entre el momento  $k_y$  y la posición del centro de la órbita de ciclotrón que realizan los electrones  $x_0 = -k_y \sqrt{\hbar/eB}$ , de modo que son equivalentes. Si llenamos los estados disponibles en el nivel de Landau, tendremos una situación como en la figura 5.1 (centro). Cada función de onda, caracterizada por  $k_y$ , se encuentra en una posición distinta en  $x$ .

Añadimos un flujo magnético  $\Phi$  en la dirección del eje  $x$  atravesando el cilindro. El valor

<sup>9</sup>Tomamos *interior* como traducción de *bulk*, que es la palabra inglesa utilizada en la literatura. Se entiende como la parte del material interior al borde, pudiéndose traducir también como volumen.

<sup>10</sup>En ausencia de bordes no se puede medir el voltaje: si intentamos medir  $\Delta V$ , las zonas de contacto del voltímetro con el material lo son.

de  $k_y$  cambiará, como en la experiencia de Aharonov y Bohm [5], añadiendo un factor de fase  $k_y \rightarrow k_y + 2\pi\Phi/L_y$  a las funciones de onda. Si el flujo insertado es únicamente un cuanto de flujo  $\Phi_0 = h/e$  variación del momento de todos los estados ocupados, (en unidades de  $\Phi_0$ ) es  $2\pi/L_y$ , que es exactamente el espaciado de la red recíproca. Esto supone un desplazamiento de todos los estados hacia un mismo lado, a una posición contigua. En el espacio físico no es posible, pues la muestra es finita, pero el momento puede seguir aumentando. Esto resulta en el desplazamiento neto de un electrón de un borde a otro, quedando por encima del nivel de Fermi y creando un hueco. Se acaba de crear un estado en cada uno de los bordes de la muestra, con cargas opuestas.

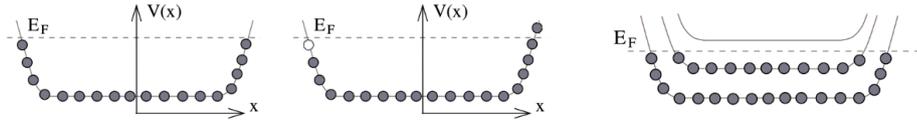


Figura 5.1: Nivel de Landau lleno (izquierda). El movimiento de los centros equivale al desplazamiento neto de un electrón de un borde a otro (centro). Generalización a  $n$  niveles de Landau es inmediata(derecha).

La energía necesaria para mover al electrón de un borde a otro la proporciona la inserción del flujo, que debido a la caída de potencial  $\Delta V$  es

$$\Delta E = e\Delta V, \quad (5.2)$$

Para obtener la conductividad Hall tenemos que relacionar la intensidad en el eje  $y$  con la caída de potencial entre ambos bordes. El operador de corriente  $\mathbf{j}_y$  podemos obtenerlo a partir de las ecuaciones de Hamilton como

$$\mathbf{j}_y = \frac{\partial H}{\partial k_y} = \frac{L_y}{2\pi} \frac{\partial H}{\partial \Phi} \quad (5.3)$$

Si computamos el valor esperado de este operador, considerando que  $|\psi\rangle$  está normalizado ( $\partial_\Phi \langle \psi | \psi \rangle = 0$ ), obtenemos

$$I_y = \langle \psi | \mathbf{j}_y | \psi \rangle = \frac{\partial \langle \psi | H | \psi \rangle}{\partial \Phi} - \langle \psi | H \partial_\Phi | \psi \rangle - (\partial_\Phi \langle \psi |) H | \psi \rangle = \frac{\partial E}{\partial \Phi} \approx \frac{\Delta E}{\Delta \Phi}, \quad (5.4)$$

donde se ha asumido que la variación del flujo con la energía es lineal. Utilizando (5.2) y sustituyendo en (5.4), se obtiene, considerando  $\Delta \Phi = h/e$

$$\sigma_{xy} = I_y/V_x = \frac{e^2}{h}, \quad (5.5)$$

que es la conductividad Hall. Su extensión a  $n$  niveles de energía resulta inmediata. Cada par de estados de borde, asociados a cada uno de los  $n$  niveles, conlleva un aumento de un cuanto de conductividad  $e^2/h$ , o lo que es lo mismo, para  $n$  niveles de Landau llenos la conductividad Hall es  $ne^2/h$ .

En resumen, la adición de un cuanto de flujo  $\Phi_0$  creará un electrón y un hueco en bordes opuestos, que se traducirá en una conductividad hall  $\sigma_{xy}$  no nula. En la relación (5.5) podemos ver la correspondencia entre el número de electrones que cruzan el nivel de Fermi (estados

de borde) y la topología de la estructura de bandas del interior, dada por la conductividad Hall.

## 5.2. Aproximación de baja energía entorno a los puntos de Dirac

Los puntos de Dirac  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$  son aquellos en los que el gap puede cerrarse ( $d_i(\mathbf{k} = \mathbf{K}, \mathbf{K}') = 0$ ) y por tanto, en los que pueden aparecer estados metálicos. Para calcularlos, consideraremos un desarrollo de Taylor a primer orden en el entorno de estos puntos, es decir, zonas de baja energía (gap prácticamente cerrado). Ahí, el momento puede escribirse como  $\mathbf{k} = \mathbf{K} + \mathbf{q}$ , donde  $\mathbf{q}$  es muy pequeño ( $|\mathbf{q}|a \ll 1$ ). Tanto en Haldane como en Kane-Mele, en esos puntos se anulan siempre las correspondientes  $d_1(\mathbf{k})$  y  $d_2(\mathbf{k})$ . Siendo  $\mathbf{q} = (q_x, q_y)$  y tomando  $\hbar v_F = 1$ , los hamiltonianos (2.12) y (4.1) quedan

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_H &= q_x \sigma_1 + q_y \sigma_2 + m \sigma_3 \\ \mathbf{H}_{KM} &= q_x \gamma_1 + q_y \gamma_2 + \lambda_{SO} \gamma_3 \end{aligned} \quad (5.6)$$

que tienen la forma de la ecuación de Dirac para (2+1) y (3+1) dimensiones respectivamente, con velocidad  $c = v_F$  la velocidad de Fermi del sólido. Los términos con  $\sigma_3$  y  $\gamma_3$  son términos de masa, correspondientes a los parámetros de las funciones  $d_3(\mathbf{k})$ .

### Validez de la aproximación

Al utilizar esta aproximación, estamos dejando a un lado la periodicidad, pasando a considerar el sistema en un plano continuo. Realizando el análisis de la topología del *bulk* usando esta aproximación, encontramos que no es suficiente para caracterizarla, pues no da el resultado correcto para el número de Chern. Sin embargo si que es válida para calcular los estados de borde. Tomemos como ejemplo el modelo de Haldane, cuyo Hamiltoniano en (5.6) es

$$\mathbf{H}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} m & q_x - iq_y \\ q_x + iq_y & -m \end{pmatrix} \quad (5.7)$$

El término de masa es función de los parámetros del sistema y, en los puntos de Dirac, es el único que contribuye al gap. Por mera sustitución de las funciones  $d_i(\mathbf{k})$  del hamiltoniano en las expresiones (2.10), la curvatura de Berry queda

$$F_{12} = \frac{m}{2(m^2 + q^2)^{3/2}}, \quad (5.8)$$

donde  $q = \sqrt{q_x^2 + q_y^2}$ . Los estados ocupados serán los que estén encerrados en el área  $\pi q^2$ . Para hallar el número de Chern integraremos sobre esos estados, teniendo en cuenta los límites de integración para el continuo

$$C = \frac{1}{2\pi} \int d^2 q F_{xy} = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \frac{m}{2(m^2 + q^2)^{3/2}} d(\pi q^2) = \frac{m}{4} \int_0^\infty \frac{1}{(m^2 + q^2)^{3/2}} 2q dq \quad (5.9)$$

Donde con el cambio de variable  $q^2 \rightarrow x$ ; ( $2q dq \rightarrow dx$ ) nos queda

$$C = \frac{m}{4} \int_0^\infty \frac{1}{(m^2 + x)^{3/2}} dx = \frac{m}{4} \left[ \frac{-2}{\sqrt{(m^2 + x)}} \right]_0^\infty = 0 - \left( -\frac{m}{2\sqrt{m^2}} \right) = \frac{\text{sign}(m)}{2} \quad (5.10)$$

El hecho de que  $C$  no sea entero es debido a que la integración se produce sobre el plano continuo. Esa condición reside en que la variedad sobre la que se integra sea compacta, como sucede si consideramos el problema en el retículo e integramos sobre el toro de Brillouin[12]. En el caso de la red, la periodicidad hace que las bandas de energía se doblen en los bordes de la zona de Brillouin. La validez de esta aproximación reside en dos cosas. Primero, esta se realiza en torno a uno de los puntos de Dirac. Tenemos que contabilizar la aportación del otro punto (*i.e.* de la otra masa) también para abordar la topología del bulk, dada por la ecuación (2.14). Por tanto, masas con signos iguales dan un sistema trivial, y masas con signos opuestos corresponden a un sistema topológico. Segundo, la aproximación de baja energía modifica el dominio sobre el que integramos la curvatura de Berry. En la red, la periodicidad hace que las bandas de energía se doblen en el límite de la primera zona de Brillouin. Esos estados *espectadores* cercanos a la frontera no se contabilizan en la aproximación, y son los que proporcionarían la otra mitad al número de Chern al integrar la curvatura (5.8) [13].

### 5.3. Correspondencia *Bulk Edge*

Vamos a ver que la relación entre estados de borde y la topología de las bandas es directa. Tomemos el modelo de Haldane (sección 2.2). El contacto de dos aislantes de Chern,  $C_1 = 1$  y  $C_2 = 0$  indica que una de las masas cambiará de signo en la interfase  $y = 0$  ( $m(y = 0) = 0$ ). Consideramos que el valor de la masa permanece constante en el interior del material, lejos de la interfase. En la aproximación de baja energía, cambiando  $\mathbf{k}$  por  $-i\nabla$ , el Hamiltoniano (5.7) tiene una solución (ver anexo G)

$$\psi_{q_x}(x, y) \propto e^{iq_x x} \exp \left[ - \int_0^y m(y') dy' \right] \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (5.11)$$

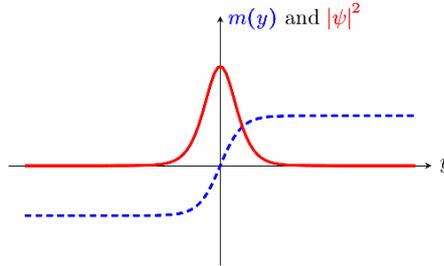


Figura 5.2: Cambio en la masa y función probabilidad del electrón en la interfase ( $y = 0$ ). El valor de ambas masas lejos del contacto se considera constante. (Figura de ref. [11])

cuya relación de dispersión (con  $\hbar v_F = 1$ ) es  $E(q_x) = q_x$ , que cruzará el nivel de Fermi con una velocidad de grupo  $dE/dq_x = 1$ , en uno de los puntos de Dirac. Esta recta conecta la banda de valencia y la de conducción, y corresponde a estados que se mueven hacia la derecha. Si al otro extremo de la muestra existe otra interfase igual, el estado quirral correspondiente será análogo,

pero con velocidad de grupo negativa  $dE/dq_x = -1$ . El estado (5.11) es localizado en el borde y equivale a un Fermión de Dirac sin masa. La interfase es un conductor unidimensional.

Si se transforma el Hamiltoniano cerca del extremo, por ejemplo por una perturbación pequeña, puede modificarse la relación de dispersión de estos estados de borde. En este caso,  $E(q_x)$  puede cambiar y *doblarse*. Al ser continua y cruzar el nivel de Fermi, una transformación tal hará que la relación únicamente pueda cruzar el nivel de Fermi un número impar de veces. Por ejemplo, si conseguimos que haya tres cruces, uno de ellos tendrá velocidad de grupo negativa  $-1$ , las otras dos positiva  $+1$ . Sin embargo, la diferencia entre el número de estados con velocidades de grupo distintas (*i.e.* la diferencia entre el número de estados que se mueven a derecha,  $N_R$  e izquierda,  $N_L$ ), no puede cambiar bajo ninguna transformación continua, y está determinada por la topología del *bulk*. Esto se conoce como correspondencia *bulk-edge*, y puede expresarse como [19]

$$N_R - N_L = \Delta C, \quad (5.12)$$

donde  $\Delta C$  es la diferencia en el número de Chern de los aislantes en contacto. La expresión (5.12) revela un hecho característico de los aislantes topológicos: los estados de borde están protegidos por la topología del *bulk*. La existencia de una fase topológica en el aislante garantiza la existencia de estados de borde en una interfase con un sistema trivial, así como la presencia de estados de borde garantiza la existencia de una topología de la estructura de bandas del *bulk* no trivial. Conocidas las propiedades del *bulk*, conocemos los estados de borde.

### Estados de borde en el modelo de Kane-Mele

En el modelo de Kane y Mele (4.1), el producto tensorial  $\sigma_z \otimes s_z$  nos separa el Hamiltoniano en dos subespacios, quedando dos sistemas análogos al de Haldane con masas opuestas, cada una asociada a un spin

$$H_{KM} = \begin{pmatrix} H_{\uparrow} & 0 \\ 0 & H_{\downarrow} \end{pmatrix} \quad \begin{aligned} H_{\uparrow} &= -i(\partial_x \sigma_1 + \partial_y \sigma_2) + \lambda_{SO} \sigma_3 \\ H_{\downarrow} &= -i(\partial_x \sigma_1 + \partial_y \sigma_2) - \lambda_{SO} \sigma_3 \end{aligned} \quad (5.13)$$

El subespacio  $H_{\uparrow}$  es el modelo de Haldane. Tenemos dos estados de borde en cada interfase, con velocidades de grupo opuestas [20]. Con un argumento como el realizado en la sección 5.1, cada uno de los Hamiltonianos de Haldane de los que se compone el modelo, debido a la diferencia de signo en la masa, acumula electrones y huecos en bordes opuestos. Ésto resulta en que los estados no llevan carga, pero sí spin. Si  $S_z$  se conserva, los espines acumulados  $|\uparrow\rangle$  y  $|\downarrow\rangle$  son debidos a números de Chern independientes  $C_{\uparrow}$  y  $C_{\downarrow}$ , y su diferencia define una conductividad Hall de spin cuantizada,  $\sigma_{xy}^s = (C_{\uparrow} - C_{\downarrow})/2$ , a partir de la cual el índice  $\mathbb{Z}_2$  es  $\nu = \sigma_{xy}^s \pmod{2}$  [19].

Si existen estados de borde en el gap, el teorema de Kramers requiere que en los puntos  $\lambda_i$  (TRIM) sean doblemente degenerados. La interacción spin-órbita rompe la degeneración fuera de esos puntos, y, como se ve en la figura 5.3, puede hacerlo de dos maneras. Si se pueden conectar a pares, los estados de borde pueden eliminarse transformando el Hamiltoniano desplazando las bandas. En cambio, si se conectan de manera que vayan de la banda valencia a la de conducción, no es posible alejar los estados de borde del nivel de Fermi. Que ocurra un caso u otro depende de la clase topológica de la estructura de bandas del *bulk*. Como estas

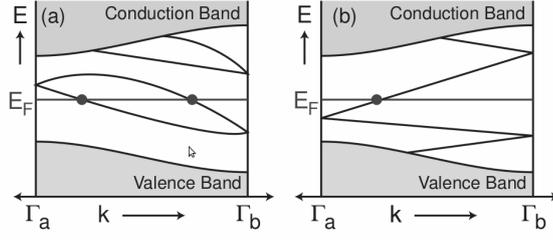


Figura 5.3: Formas de unir los pares de Kramers (Figura de Ref. [19])

bandas son simétricas en la mitad de la zona de Brillouin, cada intersección con el nivel de Fermi  $E_F$  en  $k_x$  tiene un par de Kramers en  $-k_x$ . La correspondencia entre el número de pares de estados  $N_K$  que intersectan  $E_F$  con el cambio en el invariante  $\mathbb{Z}_2$  a través de la interfase es [19]

$$N_K = \Delta\nu \pmod{2} \quad (5.14)$$

## 6. Aislantes topológicos

La propuesta de Kane y Mele de un aislante topológico con inversión temporal en el grafeno [20] no es realizable debido a que el gap abierto por la interacción spin-órbita es demasiado pequeño, del orden de  $10^{-3}meV$  [21]. Por ello es necesario considerar materiales compuestos de elementos pesados con una fuerte interacción spin-órbita. Bernevig, Hughes y Zhang aplican su modelo a un sistema con HgTe, encontrando que puede realizarse el efecto Hall cuántico de spin bajo determinadas condiciones.

### 6.1. Modelo de Bernevig-Hughes-Zhang

El modelo presentado en [9] es un tight-binding en el que se consideran cuatro estados por celda unidad: dos estados de spin  $1/2$  representados por un orbital  $s$ , y otros dos de spin  $3/2$  representando un orbital  $p$ , éstos últimos contribuyendo al término spin-órbita. Estos orbitales poseen diferente paridad, y el sistema simetría de inversión. Consideramos una red cuadrada. En la base de autoestados ( $s \uparrow, s \downarrow, p \uparrow, p \downarrow$ ), el operador paridad es diagonal, con un autovalor diferente para cada orbital

$$\mathcal{P} = \sigma_3 \otimes I \quad (6.1)$$

El Hamiltoniano del modelo es [9]

$$H(\mathbf{k}) = \sum_{i \leq 3} d_i(\mathbf{k}) \gamma_i \quad \begin{aligned} d_1(\mathbf{k}) &= A \sin(k_x) \\ d_2(\mathbf{k}) &= A \sin(k_y) \\ d_3(\mathbf{k}) &= -2B(2 - \frac{M}{2B} - \cos(k_x) - \cos(k_y)) \\ \epsilon_{\mathbf{k}} &= C - 2D(2 - \cos(k_x) - \cos(k_y)) \end{aligned} \quad (6.2)$$

donde las matrices  $\gamma_i$  son

$$\gamma_1 = \mathcal{P} = \sigma_3 \otimes I \quad \gamma_2 = \sigma_2 \otimes I \quad \gamma_3 = \sigma_1 \otimes s_3, \quad (6.3)$$

Al imponer la simetría de inversión temporal en los TRIM, en esos puntos el Hamiltoniano conserva únicamente el término con  $\gamma_1$ , el operador paridad. Los autoestados de la banda llena son

$$|\psi_{-\downarrow}\rangle = \frac{1}{N_{-\downarrow}} \begin{pmatrix} 0 \\ i(d-d_1) \\ 0 \\ d_2 + id_3 \end{pmatrix} \quad |\psi_{-\uparrow}\rangle = \frac{1}{N_{-\uparrow}} \begin{pmatrix} i(d-d_1)\frac{d_2+id_3}{d_2-id_3} \\ 0 \\ d_2 + id_3 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (6.4)$$

donde  $N_{-\downarrow}$  y  $N_{-\uparrow}$  son constantes de normalización.

Estudiamos las singularidades de estos vectores propios del Hamiltoniano haciendo  $d_2 + id_3 = te^{i\theta}$  y tomando el límite  $t \rightarrow 0$ , en función del signo de  $d_1$ . En los puntos de singularidad, si  $d_1 > 0$ , los autoestados están formados únicamente por orbitales de tipo  $p$ , mientras que en el caso  $d_1 < 0$ , están compuestos únicamente por orbitales  $s$  [11], como podemos ver

$$\begin{aligned} |\psi_{-, \downarrow}\rangle &\rightarrow \frac{1}{N_{-\downarrow}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} & |\psi_{-, \uparrow}\rangle &\rightarrow \frac{1}{N_{-\uparrow}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} & d_1 > 0 \\ |\psi_{-, \downarrow}\rangle &\rightarrow \frac{1}{N_{-\downarrow}} \begin{pmatrix} 0 \\ ie^{i\theta} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} & |\psi_{-, \uparrow}\rangle &\rightarrow \frac{1}{N_{-\uparrow}} \begin{pmatrix} ie^{i\theta} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} & d_1 < 0, \end{aligned}$$

En los TRIM, el único término que sobrevive es  $d_1(\mathbf{k})$ . Si en uno de esos puntos,  $d_1(\mathbf{k})$  cambia de signo, el electrón pasa de un orbital de tipo  $s$  ( $p$ ) a otro de tipo  $p$  ( $s$ ). Existen cuatro TRIM  $\lambda_i$  en la primera zona de Brillouin<sup>11</sup>, siendo uno de ellos el centro  $\Gamma = \mathbf{k} = (0, 0)$ . En esos puntos, un autoestado del Hamiltoniano lo es también de  $\mathcal{P}$

$$\mathbf{H}(\lambda_i)\psi = \epsilon\psi \rightarrow d_3(\lambda_i)\mathcal{P}\psi = \epsilon\psi \rightarrow \mathcal{P}\psi \frac{\epsilon}{d_3(\lambda_i)}\psi \quad (6.5)$$

Como tenemos dos bandas de energía dadas por  $\epsilon_{\pm} = \sqrt{d_3(\lambda_i)^2}$ , los autovalores de la paridad quedan

$$\mathcal{P} = \pm \text{sign}(d_3(\lambda_i))6 \quad (6.6)$$

En el caso trivial donde  $d_3$  es siempre positivo no hay singularidades. En caso de que sea negativo en todos los TRIM, una transformación  $U(2)$  de los pares de Kramers puede eliminar las singularidades. Cualquier otro caso se corresponde con una topología no trivial[11].

## Pozos de potencial en HgTe

El primer aislante topológico realizable fue teorizado por Bernevig Hughes y Zhang en 2006 [9], con un desarrollo teórico en el que realiza el efecto Hall Cuántico de Spin en el pozo de potencial formado en un semiconductor de tipo III de HgTe/CdTe. En el HgTe la interacción spin-órbita abre un gap lo suficientemente grande para poder realizar el efecto.

<sup>11</sup>La primera zona de Brillouin es un cuadrado de lado  $2\pi$ . Los puntos TRIM  $\lambda_i$  son:  $(0, 0)$ ,  $(0, \pi)$ ,  $(\pi, 0)$ ,  $(\pi, \pi)$

El modelo muestra como variando la anchura del HgTe, se llega a producir una inversión de bandas, fenómeno característico de los aislantes topológicos que implica el cierre del gap, en el punto  $\Gamma$ . En el contacto de ambos materiales, donde se cruzan, aparecen estados de borde. El CdTe posee una estructura de bandas de progresión normal, con la banda  $s\Gamma_6$  por encima de la  $p\Gamma_8$ , mientras que en el HgTe, en el régimen invertido, la banda  $s\Gamma_6$  está por debajo de la  $p\Gamma_8$ . El sistema se restringe a un modelo de seis bandas <sup>12</sup> por tanto, se consideran seis estados por celda unidad con el espinor

$$\Psi = (|\Gamma_6, 1/2\rangle, |\Gamma_6, -1/2\rangle, |\Gamma_8, 3/2\rangle, |\Gamma_8, 1/2\rangle, |\Gamma_8, -1/2\rangle, |\Gamma_8, 3/2\rangle) \quad (6.7)$$

Esta notación de bandas sería la típica de un material tridimensional. En los pozos de potencial en la dirección [001] la simetría cúbica se rompe, quedando una simetría axial de rotación en el plano. En este caso, las bandas se combinan entre sí para formar los estados de spin ( $\pm$ ) de tres subbandas  $E1$ ,  $H1$ ,  $L1$  [21], esta última estando mucho mas separada de las otras y pudiéndose despreciar, quedando un modelo efectivo de cuatro bandas. El Hamiltoniano efectivo, en la base  $|E1, m_J = 1/2\rangle, |H1, m_J = 3/2\rangle, |E1, m_J = -1/2\rangle, |E1, m_J = -3/2\rangle$ , es

$$H_{eff}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} H(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & H^*(-\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad H(k) = \epsilon_{\mathbf{k}} I_{2 \times 2} + d_i(\mathbf{k}) \sigma_i \quad (6.8)$$

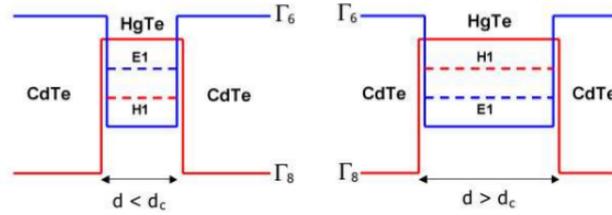


Figura 6.1: Progresión de las bandas  $\Gamma_6$  y  $\Gamma_8$  del sistema HgTe/CdTe a lo largo de la muestra (Figura de ref. [9])

En el HgTe real, la simetría de inversión temporal se rompe ligeramente y existen términos fuera de la diagonal. Sin embargo, al ser pequeños y no cerrar el gap, pueden despreciarse ya que, por continuidad adiabática, la física debida a la topología del sistema seguirá siendo válida cuando se añadan esos términos[13]. El Hamiltoniano efectivo (6.8) es el del modelo de Bernevig-Hughes-Zhang (6.2). Aquí el gap viene representado por el parámetro  $M$ , y es la diferencia de energía entre las bandas  $E1$  y  $H1$  en el punto  $\Gamma$ . La constante  $C$  asigna el cero de la energía al valor mas alto de la banda de valencia. Para anchuras  $40\text{\AA} < d < 70\text{\AA}$ , las bandas  $E1$  y  $H1$  están separadas del resto, a una distancia mayor que  $30\text{meV}$ . La inversión de las bandas en el HgTe lleva a un cruce de niveles de energía a una anchura crítica  $d = d_c \sim 64\text{\AA}$  de la capa de HgTe. En el caso  $d > d_c$ , se invierte la progresión de las bandas de energía, de manera que  $E(\Gamma_6) < E(\Gamma_8)$ .

En los TRIM  $\lambda_i$  las  $d_i(\lambda_i)$  se anulan para  $M/2B = 0$ . Podemos aplicar la aproximación de baja energía al Hamiltoniano, donde las  $d_i(\mathbf{k})$  quedan

<sup>12</sup>Se desprecia la banda  $\Gamma_7$  por no tener efecto apreciable en la estructura de bandas.

$$d_1 + id_2 = A(q_x + iq_y) \quad d_3 = M - B(q_x^2 + q_y^2) \quad \epsilon_k = C - D(q_x^2 + q_y^2) \quad (6.9)$$

Es el cambio de signo de  $M$  en la transición sobre  $\Gamma$  el que definirá el cambio en la conductividad Hall  $\Delta\sigma_{xy} \propto \Delta C = 1$  para cada uno de los Hamiltonianos  $2 \times 2$  del Hamiltoniano efectivo. La conductividad Hall de spin vendrá dada por la diferencia de ambos bloques siendo  $\Delta\sigma_{xy}^s \propto 2$ . Debido a la correspondencia *bulk-edge*, la transición en  $d = d_c$  separa dos estados de la materia que difieren en un par de estados de borde, por tanto, una de esas fases será topológica y estará caracterizada por el índice  $\mathbb{Z}_2$  de Kane y Mele[9].

## 6.2. Resultados experimentales

En 2007, efecto Hall cuántico de spin se detecta experimentalmente de acuerdo con la predicción de Bernevig *et al.*[22]. Los pozos de potencial en el HgTe se generan en un semiconductor de tipo III de HgTe/Hg<sub>0,3</sub>Cd<sub>0,7</sub>Te a bajas temperaturas.

La extensión del invariante  $\mathbb{Z}_2$  a las tres dimensiones es directa pero llena de matices [14]. Como característica inmediata, los estados de borde son ahora de superficie. Además, se pueden clasificar en dos tipos de materiales: fuertes, si tienen un índice  $\mathbb{Z}_2$  no trivial, y débiles, si el índice es trivial, pero el sistema puede descomponerse en múltiples copias del efecto Hall de spin cuántico bidimensionales. La distinción de las conductividades de las superficies y las del *bulk* resulta compleja. Por ello, la experimentación en sistemas tridimensionales es más problemática [19]. Sin embargo en los últimos años se han conseguido observar algunos de estos materiales.

En 2007 Fu y Kane predijeron [16] que sólidos tridimensionales con Bismuto pueden presentar estados topológicos. El primer aislante topológico tridimensional (fuerte) realizado experimentalmente ha sido en una aleación de Bismuto y Antimonio, en 2008, por Hsieh *et al.*[23]. Estos elementos son semimetales pertenecientes al grupo **V** y tienen gap finito, pero la superposición de las bandas de energía genera un gap indirecto negativo. La aleación Bi<sub>1-x</sub>Sb<sub>x</sub> es un aislante topológico fuerte para concentraciones con  $0,07 < x < 0,22$ . Los estados de superficie se observaron mediante espectroscopia de fotoemisión de ángulo resuelto (ARPES). Esta técnica, basada en el efecto fotoeléctrico, arranca electrones únicamente de la superficie de la muestra, lo que la hace idónea para estudiar los estados de superficie. En 2009, Y. Xia *et al.* observan los estados de superficie del Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>, a temperatura ambiente [24]. En ese mismo año, Hsieh *et al.* miden la polarización de spin en los estados de superficie del BiSb[25]. Otros Aislantes topológicos predichos por Fu y Kane son los compuestos  $\alpha$ Al/HgTe y PbTe/SnTe[16].

## 7. Conclusiones

Los modelos teóricos que se han presentado representan hitos en el desarrollo de la teoría de bandas topológica. En el modelo de Haldane [7] es la existencia de una conductividad Hall no nula en ausencia de campo magnético la que conlleva la aparición de estados de borde metálicos. Kane y Mele [8, 20] añaden la interacción spin-órbita y basan su caracterización topológica en la simetría de inversión temporal y en la aparición de la degeneración de Kramers. Ambos estados topológicos, caracterizados por índice  $\mathbb{Z}$  y  $\mathbb{Z}_2$  respectivamente, son excluyentes, debido a las propiedades de la curvatura de Berry. Estos invariantes caracterizan sendas clases de equivalencia del Hamiltoniano,  $U(1)$  y  $SU(2)$  respectivamente. Los estados de borde, en ambos casos, forman un conductor unidimensional, con una importante diferencia en el de Kane y Mele: la corriente que transporta no es de carga, sino de spin, equivaliendo a *medio* estado de Haldane. Esto hace que el modelo teorizado por Kane-Mele sea especialmente interesante en el campo de la spintrónica, electrónica basada en el spin del electrón.

Uno de los conceptos clave en los materiales topológicos es que esos estados de borde están protegidos frente a perturbaciones por la topología de la estructura de bandas del interior del aislante, siendo inmunes a fenómenos disipativos como el backscattering o la localización de Anderson, siendo esta una ventaja clara frente a un conductor convencional. Esos estados de borde son fermiones de Dirac sin masa.

No fue hasta hace unos años que se pudieron observar experimentalmente estados de borde. Como señala Bernevig en su modelo experimental del efecto Hall cuántico de spin [9] formulado en 2006, la capacidad tecnológica para llevar acabo experimentos en esa dirección estaba al alcance de manera reciente. En ese sentido, se requería aún un gran desarrollo de la ingeniería para producir materiales bidimensionales (exfoliación mecánica, catálisis, deposición por láser pulsado, etc.) y poder producir materiales bidimensionales de mayor calidad. Aún se requieren grandes avances en para poder desarrollar todas sus aplicaciones potenciales.

Para finalizar, el estudio de los aislantes topológicos ha crecido exponencialmente durante la última década, tanto teórica como experimentalmente, motivando la búsqueda de índices topológicos en nuevos materiales que puedan presentar las interesantes propiedades estudiadas en este trabajo.

## Referencias

- [1] K. V. Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper. *Physical Review Letters*, 45:494–497, August 1980.
- [2] R. B. Laughlin. *Phys. Rev. B*, 23:5632–5633, May 1981.
- [3] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs. *Phys. Rev. Lett.*, 49:405–408, Aug 1982.
- [4] M. V. Berry. *Proceedings of the Royal Society of London Series A*, 392:45–57, March 1984.
- [5] Y. Aharonov and D. Bohm. *Physical Review*, 115:485–491, August 1959.
- [6] Barry Simon. *Phys. Rev. Lett.*, 51:2167–2170, Dec 1983.
- [7] F. D. M. Haldane. *Phys. Rev. Lett.*, 61:2015–2018, Oct 1988.
- [8] C. L. Kane and E. J. Mele. *Phys. Rev. Lett.*, 95:146802, Sep 2005.
- [9] B. Andrei Bernevig, Taylor L. Hughes, and Shou-Cheng Zhang. *Science*, 314(5806):1757–1761, 2006.
- [10] G. W. Semenoff. *Physical Review Letters*, 53:2449–2452, December 1984.
- [11] M. Fruchart and D. Carpentier. An introduction to topological insulators. *Comptes Rendus Physique*, 14:779–815, November 2013.
- [12] M. Nakahara. *Geometry, topology, and physics*. Taylor and Francis, 2003.
- [13] B. Andrei Bernevig and Taylor L. Hughes. *Topological insulators and topological superconductors*. Princeton University Press, 2013.
- [14] Liang Fu, C. L. Kane, and E. J. Mele. *Phys. Rev. Lett.*, 98:106803, Mar 2007.
- [15] J. J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics*. Addison Wesley, 1 edition, 1993.
- [16] L. Fu and C.L. Kane. *Phys. Rev. Lett.*, 76(4):045302, July 2007.
- [17] L. Fu and C.L. Kane. *Physical Review Letters*, 74(19):195312, November 2006.
- [18] H. B. Nielsen and M. Ninomiya. *Physics Letters B*, 105:219–223, October 1981.
- [19] M. Z. Hasan and C. L. Kane. Colloquium: Topological insulators. *Reviews of Modern Physics*, 82:3045–3067, October 2010.
- [20] C. L. Kane and E. J. Mele. *Physical Review Letters*, 95(22):226801, November 2005.
- [21] A. Pfeuffer-Jeschke. Ph.d. thesis, universidad de wurzburg, alemania, 2000.
- [22] Markus König, Steffen Wiedmann, Christoph Brüne, Andreas Roth, Hartmut Buhmann, Laurens W. Molenkamp, Xiao-Liang Qi, and Shou-Cheng Zhang. *Science*, 318(5851):766–770, 2007.
- [23] D. Hsieh, D. Qian, L. Wray, Y. Xia, Y. S. Hor, R. J. Cava, and M. Z. Hasan. *Nature*, 452:970–974, April 2008.
- [24] Y. Xia, L. Wray, D. Qian, D. Hsieh, A. Pal, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y. S. Hor, R. J. Cava, and M. Z. Hasan. *ArXiv e-prints*, December 2008.
- [25] D. Hsieh, Y. Xia, L. Wray, D. Qian, A. Pal, J. H. Dil, J. Osterwalder, F. Meier, G. Bihlmayer, C. L. Kane, Y. S. Hor, R. J. Cava, and M. Z. Hasan. *Science*, 323(5916), 2009.