

ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL

FACULTAD DE CIENCIAS

ESTUDIO DEL MONOPOLO Y DIPOLO ELÉCTRICO EN EL MODELO TIGHT-BINDING QTI (QUADRUPOLE TOPOLOGICAL INSULATOR) CON CUADRUPOLO ELÉCTRICO FRACCIONALIZADO

TRABAJO PREVIO A LA OBTENCIÓN DEL TÍTULO DE FÍSICO

PROYECTO DE INVESTIGACIÓN

RODRIGO EDUARDO SANDOVAL BRITO

`rodrigo.sandoval@epn.edu.ec`

Director: LEONARDO BASILE Ph.D

`leonardo.basile@epn.edu.ec`

Codirector: WLADMIR BENALCAZAR Ph.D

`wladimir.benalcazar@psu.edu`

Quito, Agosto 2021

DECLARACIÓN

Yo, RODRIGO EDUARDO SANDOVAL BRITO, declaro bajo juramento que el trabajo aquí escrito es de mi autoría; que no ha sido previamente presentado para ningún grado o calificación profesional; y que he consultado las referencias bibliográficas que se incluyen en este documento.

A través de la presente declaración cedo mis derechos de propiedad intelectual, correspondientes a este trabajo, a la Escuela Politécnica Nacional, según lo establecido por la Ley de Propiedad Intelectual, por su reglamento y por la normatividad institucional vigente.

Rodrigo Eduardo Sandoval Brito

CERTIFICACIÓN

Certificamos que el presente trabajo fue desarrollado por RODRIGO EDUARDO SANDOVAL BRITO, bajo nuestra supervisión.

Leonardo Basile Ph.D

Director del Proyecto

Wladmir Benalcazar Ph.D

Codirector del Proyecto

Esta tesis la dedico a la memoria de mi abuelita

LAURA MEJÍA

quien fue la persona que más confió en mí, brindándome su amor incondicional en todo momento y con quien tuve una relación más estrecha que con mi madre.

Siempre te voy a extrañar.

AGRADECIMIENTOS

Principalmente agradezco a mis dos mentores intelectuales y tutores de este proyecto, al Dr. Wladimir Benalcazar quien mientras seguía su posdoctorado en la Universidad de Pensilvania me guio durante todo el proceso de esta tesis y con quien siempre mantendré una deuda de gratitud por haber compartido conmigo un poco de su vasto conocimiento en este fascinante campo de la física. Y al Dr. Leonardo Basile quien además de ser uno de los mejores maestros que he tenido en la carrera, también ha sido un gran modelo a seguir tanto en el aspecto científico como en el humano. Ambos me han ayudado revisando y corrigiendo el presente proyecto de titulación, sin embargo, cualquier errata que se encuentre en este trabajo es completa responsabilidad mía y pido disculpas de antemano.

Además, quisiera agradecer de manera especial a mi familia (a mi madre Sofía, a mi padre Rodrigo y a mis hermanos Manolo, Sofía y Mateo) por su paciencia y por su apoyo económico, que junto a mis trabajos esporádicos me ayudaron a culminar esta apasionante carrera.

También agradezco a mis amigos más cercanos, a mi mejor amigo de la vida Christian Yopez, con el cual hemos compartido innumerables experiencias desde el colegio hasta la universidad, convirtiéndose en una de las personas que más ha influido en mi vida y en mi personalidad. A mi mejor amigo de la carrera Daniel Aguilar que a pesar de conocernos varios semestres después de haber comenzado la carrera, terminamos siendo grandes amigos y ha sido un gran soporte intelectual desde entonces. A mi entrañable amigo Erik Toapanta quien fue mi camarada durante toda la travesía de la carrera, convirtiéndose en la única persona que empezó y terminó la carrera junto conmigo. Y a mis queridos amigos matemáticos, a William Ayauca por sus palabras de aliento en los momentos más difíciles y por haber sido de invaluable ayuda durante mis primeros semestres de la carrera, y a Farhad Ghadiri por su espontánea y sincera personalidad.

Finalmente agradezco a mis queridos maestros de la carrera, al Dr. Cesar Costa por su manera *cool* de enseñar la física, al Dr. Luis Lascano por su manera metódica y simple de explicar temas complejos, al Dr. Henry Osorio por ser un profesor que brinda confianza dentro y fuera de sus clases, al Dr. Edy Ayala y al Dr. Cristian Santacruz que me enseñaron que a veces para aprender es necesario esforzarse mucho, y al resto de mis maestros que me han enseñado tanto ¡¡Gracias!!.

NOTACIÓN

Símbolo	Significado
OBC	Open Boundary Conditions
PBC	Periodic Boundary Conditions
ψ^{elec}	Función de onda electrónica (vector propio del Hamiltoniano)
PDF	Probability Density Function ($ \psi^{\text{elec}} ^2$)
γ	Amplitud de probabilidad de transición dentro de la misma celda unitaria (intra-cell).
λ	Amplitud de probabilidad de transición entre celdas unitarias contiguas (inter-cell).
δ	Energía intrínseca de cada sitio de la red cristalina (energía <i>on-site</i>)
P_{occ}	Operador proyector de las bandas ocupadas
ZOOM	Cálculo de los centros de Wannier respecto a una sola celda unitaria (Pg.41)

Modelo SSH (Su-Schrieffer-Heeger)

Modelo unidimensional con momento dipolar eléctrico cuantizado

Símbolo	Significado
N	Número de celdas unitarias totales
$N_o=1$	Número de orbitales ocupados por celda unitaria
$N_u = 1$	Número de orbitales desocupados por celda unitaria
$N_{\text{orb}} = 2$	Número de orbitales totales por celda unitaria ($N_{\text{orb}} = N_o + N_u$)
$N_{\text{occ}} = NN_{\text{orb}} = 2N$	Número de orbitales ocupados totales

Modelo QTI (Quadrupole Topological Insulator)

Modelo bidimensional con momento cuadrupolar eléctrico cuantizado

Símbolo	Significado
Q^{esquina}	Acumulación de carga en la esquina del cristal
p^{borde}	Polarización en el borde del cristal (polarización superficial)
q_{xy}	Momento cuadrupolar eléctrico en el interior del cristal
N	Número de celdas unitarias por lado de red cristalina cuadrada
$N_o=2$	Número de orbitales ocupados por celda unitaria
$N_u = 2$	Número de orbitales desocupados por celda unitaria
$N_{\text{orb}} = 4$	Número de orbitales totales por celda unitaria ($N_{\text{orb}} = N_o + N_u$)
$N_{\text{occ}} = N^2 N_{\text{orb}} = 4N^2$	Número de orbitales ocupados totales

Índice general

Declaración de Autoría	I
Certificado	II
Dedicatoria	III
Agradecimientos	IV
Notación	V
Índice de Figuras	VIII
Resumen	XIV
Abstract	XV
1. Introducción	1
1.1. Descripción del problema	1
1.2. Relación entre los momentos multipolares eléctricos	2
1.2.1. Expansión multipolar	2
1.2.2. Contribuciones del dipolo y del cuadrupolo a la carga eléctrica	6
1.2.3. Cálculo del monopolo eléctrico en la mecánica cuántica . . .	10
1.2.4. Cálculo del dipolo eléctrico de acuerdo a la teoría moderna de la polarización	11
1.2.4.1. Operador mecánico cuántico de la posición en sis- temas extendidos	16
1.3. Contenido del Trabajo de Titulación	17
2. Modelo <i>tight-binding</i> SSH de un aislante cristalino unidimensio- nal	19
2.1. Descripción del modelo unidimensional SSH	19
2.2. Implementación del Hamiltoniano	22
2.3. Valores propios del Hamiltoniano	24
2.4. Vectores propios del Hamiltoniano	26
2.5. Acumulación de carga en los extremos del cristal unidimensional . .	28
2.6. Polarización eléctrica y centros de Wannier	33
2.6.1. Cuantización de la polarización (polarization quantum) . . .	33

2.6.2. Centros de Wannier	35
2.6.2.1. Valor esperado del operador posición	35
2.6.3. Polarización eléctrica	42
2.7. Bombeo adiabático de carga	48
3. Modelo <i>tight-binding</i> QTI de un aislante cristalino bidimensional	55
3.1. Descripción del modelo bidimensional QTI	55
3.2. Implementación del Hamiltoniano	57
3.3. Valores propios del Hamiltoniano	59
3.4. Vectores propios del Hamiltoniano	62
3.5. Polarizaciones superficiales y polarización interna	64
4. Resultados y Análisis	73
4.1. Acumulación de carga en las esquinas del cristal bidimensional	73
4.2. Polarización interna	78
4.3. Polarizaciones superficiales	81
4.4. Polarización promedio en el eje X	82
4.5. Cuadrupolo eléctrico interno	86
4.6. Generalización de los resultados por medio del bombeo adiabático de carga	89
4.7. Resumen sobre los resultados más relevantes del proyecto	90
5. Conclusiones	93
6. Apéndice	94
6.1. Construcción de gráficas del modelo SSH	94
6.2. Construcción de gráficas del modelo QTI	97
Bibliografía	101

Índice de figuras

1.1.	Multipolos eléctricos con sus respectivos decaimientos de potencial .	2
1.2.	Distribución de carga que genera un potencial eléctrico $V(\mathbf{r})$ en el punto P	3
1.3.	Esquema de aislante cristalino sin cuadrupolo interno q_{xy} . Donde la acumulación de carga en la esquina Q^{esquina} se produce debido a un par de polarizaciones superficiales convergentes p^{borde}	6
1.4.	Esquema de aislante cristalino con cuadrupolo interno q_{xy} . Donde la acumulación de carga en la esquina Q^{esquina} se produce debido al momento cuadrupolar interno q_{xy} , el mismo que también induce polarizaciones en la superficie del material p^{borde}	7
1.5.	Transporte paralelo a través de una esfera	12
1.6.	1) Bandas de energía de un aislante, donde u_1 es la función de onda de los estados ocupados y u_2 de los desocupados. 2) Fase resultante de una vuelta completa de la función de onda de los estados ocupados u_1 . 3) Dicha fase es proporcional a las posiciones electrónicas y por tanto al dipolo eléctrico del material.	13
2.1.	Modelo <i>tight-binding</i> SSH de un aislante cristalino unidimensional compuesto de 2 sitios por celda unitaria, con N celdas unitarias ($N = 3$) y con amplitudes de transición intra-cell γ e inter-cell λ . . .	20
2.2.	Modelo <i>tight-binding</i> SSH con $N = 20$ celdas unitarias. Donde los sitios de cada celda unitaria se los enumera de derecha a izquierda, por lo tanto los átomos de las fronteras corresponden al sitio 1 y 40.	20
2.3.	Forma genérica de una matriz de transición en el modelo SSH.	22
2.4.	Valores propios del Hamiltoniano en la fase trivial.	24
2.5.	Valores propios del Hamiltoniano en la fase topológica (sin término <i>on-site</i> δ). Donde los estados con energía igual a cero son degenerados.	25
2.6.	Valores propios del Hamiltoniano cuando $ \gamma = \lambda $ correspondiente al punto metálico del modelo, donde se cierran las bandas (<i>gapless</i>).	26
2.7.	Espectro de energía en función de γ , con fase trivial en el intervalo: $-1.5 \leq \gamma < -1$ y $1 < \gamma \leq 1.5$, fase topológica en el intervalo: $-1 < \gamma < 1$ y energías en cero (línea horizontal) correspondientes a los estados degenerados de la frontera.	26
2.8.	PDFs del estado número 10 y 30 en la fase topológica (Estados deslocalizados).	27

2.9. PDFs de los estados degenerados de la fase topológica con valor de γ lejano al valor de λ (Estados localizados en los extremos del cristal, en los sitios 1 y 40, vease la fig. 2.2).	27
2.10. PDFs de los estados degenerados de la fase topológica con valor de γ cercano al valor de λ (Estados no completamente localizados en los extremos del cristal).	28
2.11. Monopolo eléctrico del modelo SSH en la fase trivial (sin término <i>on-site</i> δ).	29
2.12. Monopolo eléctrico en la fase topológica (sin término <i>on-site</i> δ).	30
2.13. Red cristalina del modelo SSH con simetría de inversión cuando $\delta = 0$ (izquierda) y sin simetría de inversión cuando $\delta \neq 0$ (derecha).	31
2.14. Valores propios del Hamiltoniano en la fase topológica (con término <i>on-site</i> δ). Donde los estados cercanos a energía cero ya no son degenerados.	32
2.15. Monopolo eléctrico en la fase trivial (con término <i>on-site</i> δ).	32
2.16. Monopolo eléctrico en la fase topológica (con término <i>on-site</i> δ).	32
2.17. Dipolo eléctrico formado en el modelo SSH.	33
2.18. Vista frontal de una red cristalina unidimensional formada por aniones y cationes alternados, con dos distintas celdas unitarias tridimensionales. La primera celda unitaria contiene un dipolo anión-cación y la segunda contiene un dipolo cación-anión. Siendo a la constante de la red cristalina y d la distancia anión-cación.	34
2.19. Esquema de las celdas unitarias (puntos rojos) en red cristalina con PBC. Siendo N el número de celdas unitarias ($N = 4$), R el contador de las celdas unitarias ($R = 1, 2, 3, 4$) y U_x el operador posición proporcional a $e^{i\frac{2\pi}{N}\hat{R}}$	36
2.20. Magnitudes de los valores propios de $\langle U_x \rangle$ en la fase topológica con $N = 10$	38
2.21. Magnitudes de los valores propios de $\langle U_x \rangle$ en la fase topológica con $N = 20$	38
2.22. Centros de Wannier en fase trivial con OBC, ubicados justo en el centro de cada celda unitaria. Líneas grises representan los centros de cada celda unitaria.	39
2.23. Centros de Wannier en fase topológica con OBC, casi todos desplazados media celda unitaria, con excepción del sexto centro de Wannier (punto rojo). Líneas grises representan los centros de cada celda unitaria.	39
2.24. Centros de Wannier en fase topológica con OBC, todos desplazados media celda unitaria. Líneas grises representan los centros de cada celda unitaria.	40
2.25. Electrones junto a sus núcleos en la fase trivial sin producir dipolo ($p = 0$) y electrones desplazados media celda unitaria formando dipolo ($p = 1/2$) en la fase topológica.	40

2.26. Centros de Wannier en función de γ con fase trivial en el intervalo: $-1.5 \leq \gamma < -1$ y $1 < \gamma \leq 1.5$, fase topológica en el intervalo: $-1 < \gamma < 1$. Líneas grises representan los centros de cada celda unitaria.	40
2.27. Esquema de las celdas unitarias con matriz $\langle U_x \rangle$ sin elevar (izquierda), con matriz $\langle U_x \rangle$ elevada al cuadrado (medio) y con matriz $\langle U_x \rangle$ elevada a N (derecha). De modo que al elevar a la N -ésima potencia las celdas unitarias queden completamente alineadas.	41
2.28. Centros de Wannier de una sola celda unitaria (calculados por medio del procedimiento del ZOOM) con fase trivial en el intervalo: $-1.5 \leq \gamma < -1$ y $1 < \gamma \leq 1.5$ y fase topológica en el intervalo: $-1 < \gamma < 1$. Línea gris representa el centro de la celda unitaria.	42
2.29. Esquema de los centros de las celdas unitarias (puntos rojos) en red cristalina con PBC. Siendo N el número de celdas unitarias ($N = 4$), R el contador de las celdas unitarias ($R = 1, 2, 3, 4$) y ν_1 el desplazamiento del electrón (puntos azules) respecto al centro de su respectiva celda unitaria.	43
2.30. Hamiltoniano $H(\mathbf{k})$ del modelo SSH graficado en el espacio bidimensional de Pauli (σ_1, σ_2). Fijando $\lambda = 1$ como el radio de los círculos y variando los centros γ de modo que el Hamiltoniano en la fase trivial H^{triv} ($\gamma > 1$) no encierra la carga topológica, mientras que el Hamiltoniano en la fase topológica H^{topo} ($\gamma < 1$) si la encierra, pero pasando siempre por el Hamiltoniano crítico H^{met} ($\gamma = 1$) correspondiente al punto metálico donde las bandas se cierran (<i>gapless</i>).	50
2.31. Hamiltoniano $H(\mathbf{k})$ del modelo SSH graficado en el espacio bidimensional de Pauli (σ_1, σ_2), el cual al pasar de la fase topológica H^{topo} a la fase trivial H^{triv} , siempre tendrá que pasar primero por el punto crítico H^{met} . Por este motivo es necesario añadir la tercera dimensión de Pauli σ_3	51
2.32. Hamiltoniano del modelo SSH con bombeo de carga $H^{\text{pump}}(\mathbf{k}, t)$ de la ec. 2.51 que adopta una forma <i>semejante</i> a una dona cuando se lo grafica en el espacio tridimensional de Pauli ($\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$).	52
2.33. Centros de Wannier del Modelo SSH con bombeo de carga, donde todos los electrones se mueven una celda unitaria en un periodo de $t [0, 2\pi]$. Líneas grises representan los centros de cada celda unitaria.	53
2.34. Centros de Wannier (de una sola celda unitaria) del Modelo SSH con bombeo de carga, donde el electrón se mueven una celda unitaria completa en un periodo de $t [0, 2\pi]$	54
2.35. Espectro de energía del Modelo SSH con bombeo de carga en un periodo de t de $[0, 2\pi]$, donde las líneas entrecruzadas del medio corresponden a los estados de las fronteras del cristal.	54
3.1. Esquema del modelo <i>tight-binding</i> QTI con probabilidad de transición intra-cell γ (líneas rojas) e inter-cell λ (líneas verdes). Líneas entrecortadas representan hoppings negativos.	56

3.2. Esquema del modelo <i>tight-binding</i> QTI con $N = 4$ celdas unitarias por lado. Numeración en azul representa el orden de las celdas unitarias y numeración en negro representan el orden de los sitios de la red cristalina.	57
3.3. Valores propios del Hamiltoniano en la fase trivial.	59
3.4. Valores propios del Hamiltoniano en la fase topológica (sin término <i>on-site</i> δ).	60
3.5. Valores propios del Hamiltoniano en el punto metálico.	60
3.6. Esquema de las energías <i>on-site</i> δ en los sitios de la celda unitaria.	61
3.7. Valores propios del Hamiltoniano en la fase topológica (con término <i>on-site</i> δ).	61
3.8. Espectro de energía en función de γ , con fase trivial en el intervalo: $-1.5 \leq \gamma < -1$ y $1 < \gamma \leq 1.5$, fase topológica en el intervalo: $-1 < \gamma < 1$ y energías en cero (línea horizontal) correspondientes a los estados degenerados en las esquinas del cristal.	62
3.9. PDFs de los cuatro estados degenerados en la fase topológica, correspondientes a las energías 31, 32, 33 y 34 de la fig. 3.4, ubicados en los sitios 2,16,51 y 61 que corresponden a las esquinas de la red cristalina de la fig. 3.2 con 4 celdas unitarias por lado ($N = 4$).	63
3.10. PDFs de los estados correspondientes a las energías 1, 20, 40 y 64 de la fig. 3.4 en la fase topológica, para una red cristalina con 4 celdas unitarias por lado ($N = 4$). (Estados deslocalizados).	63
3.11. PDFs de los cuatro estados degenerados de la fase topológica en red cristalina con 30 celdas unitarias por lado ($N = 30$). Donde el primer estado corresponde a la segunda esquina, el segundo estado corresponde a la tercera esquina, el tercer estado corresponde a la primera esquina y el cuarto estado corresponde a la cuarta esquina del cristal. (Estados localizados).	64
3.12. Forma cilíndrica de la red cristalina del modelo QTI al aplicar PBC en el eje X y OBC en el eje Y.	65
3.13. Centros de Wannier en la fase trivial con PBC en ambos ejes.	66
3.14. Centros de Wannier en la fase topológica con PBC en ambos ejes.	67
3.15. Centros de Wannier en la fase trivial con PBC en el eje X y OBC en el eje Y.	67
3.16. Centros de Wannier en la fase topológica con PBC en el eje X y OBC en el eje Y. Donde se observa la formación de pares de centros de Wannier en las posiciones 4, 5, 12, 13, 20, 21, 28 y 29, correspondientes a los bordes horizontales de la red cristalina.	68
3.17. PDFs de $\langle U_x \rangle$ correspondientes a los centros de Wannier número 4, 5, 12 y 13, localizados en los sitios de la red cristalina número 8 y 10, 53 y 59, 12 y 14, 57 y 63, respectivamente, los cuales pertenecen a los bordes horizontales de la red cristalina de la fig. 3.2.	69
3.18. PDFs de $\langle U_x \rangle$ correspondientes a los centros de Wannier número 20, 21, 28 y 29, localizados en los sitios de la red cristalina número 2 y 16, 51 y 61, 4 y 6, 49 y 55, respectivamente, los cuales pertenecen a los bordes horizontales de la red cristalina de la fig. 3.2.	70

3.19. Centros de Wannier con PBC en X y OBC en Y, en función de γ , con fase trivial en el intervalo: $-1.5 \leq \gamma < -1$ y $1 < \gamma \leq 1.5$, fase topológica en el intervalo: $-1 < \gamma < 1$. Donde se observa que los centros de Wannier se ubican siempre simétricos respecto a cero y además se aprecia una acumulación de centros de Wannier en los extremos -0.5 y 0.5 en la fase topológica. Línea gris representa el centro de la celda unitaria.	72
4.1. Carga eléctrica del cristal bidimensional del modelo QTI en la fase trivial, sin término <i>on-site</i> δ y con valor de γ lejano al valor de λ	74
4.2. Carga eléctrica del cristal bidimensional del modelo QTI en la fase topológica, sin término <i>on-site</i> δ y con valor de γ lejano al valor de λ	74
4.3. Carga eléctrica del cristal bidimensional del modelo QTI en la fase trivial, con término <i>on-site</i> $\delta = 1e - 3$ y con valor de γ lejano al valor de λ	75
4.4. Carga eléctrica del cristal bidimensional del modelo QTI en la fase topológica, con término <i>on-site</i> $\delta = 1e - 3$ y con valor de γ lejano al valor de λ	76
4.5. Carga eléctrica del cristal bidimensional del modelo QTI en la fase trivial, con término <i>on-site</i> $\delta = 1e - 3$ y con valor de γ cercano al valor de λ	76
4.6. Carga eléctrica del cristal bidimensional del modelo QTI en la fase topológica, con término <i>on-site</i> $\delta = 1e - 3$ y con valor de γ cercano al valor de λ	77
4.7. Carga eléctrica del cristal bidimensional del modelo QTI en la fase trivial, con término <i>on-site</i> $\delta = 1e - 8$ y con valor de γ cercano al valor de λ	78
4.8. Polarización interna de la red cristalina del modelo QTI en la fase trivial.	79
4.9. Polarización interna de la red cristalina del modelo QTI en la fase topológica.	79
4.10. Marco de referencia inicial (X,Y) que al ser desplazado una distancia \mathbf{R} se convierte en un nuevo marco de referencia (X',Y').	80
4.11. Polarizaciones de los bordes horizontales de la red cristalina del modelo QTI en la fase topológica, con término <i>on-site</i> $\delta = 1e - 3$ y con valor de γ lejano al valor de λ	81
4.12. Polarizaciones de los bordes horizontales de la red cristalina del modelo QTI en la fase topológica, con término <i>on-site</i> $\delta = 1e - 3$ y con valor de γ cercano al valor de λ	82
4.13. Polarización promedio de las filas de las celdas unitarias del modelo QTI en la fase trivial, con término <i>on-site</i> $\delta = 1e - 3$ y con valor de γ lejano al valor de λ	83
4.14. Polarización promedio de las filas de las celdas unitarias del modelo QTI en la fase topológica, con término <i>on-site</i> $\delta = 1e - 3$ y con valor de γ lejano al valor de λ	83

4.15. Polarización promedio de las filas de las celdas unitarias del modelo QTI en la fase trivial, con término <i>on-site</i> $\delta = 1e - 3$ y con valor de γ cercano al valor de λ	84
4.16. Polarización promedio de las filas de las celdas unitarias del modelo QTI en la fase trivial, con término <i>on-site</i> $\delta = 1e - 3$ y con valor de γ cercano al valor de λ . Respecto a la escala de los valores de las polarizaciones superficiales en la fase topológica.	84
4.17. Polarización promedio de las filas de las celdas unitarias del modelo QTI en la fase topológica, con término <i>on-site</i> $\delta = 1e - 3$, con valor de γ cercano al valor de λ y con $N = 10$ celdas unitarias por lado.	85
4.18. Polarización promedio de las filas de las celdas unitarias del modelo QTI en la fase topológica, con término <i>on-site</i> $\delta = 1e - 3$, con valor de γ cercano al valor de λ y con $N = 20$ celdas unitarias por lado.	85
4.19. Polarización promedio de las filas de las celdas unitarias del modelo QTI en la fase trivial, con término <i>on-site</i> $\delta = 1e - 9$, con valor de γ muy lejano al valor de λ y con $N = 20$ celdas unitarias por lado.	86
4.20. Polarización promedio de las filas de las celdas unitarias del modelo QTI en la fase topológica, con término <i>on-site</i> $\delta = 1e - 9$, con valor de γ muy lejano al valor de λ y con $N = 20$ celdas unitarias por lado.	87
4.21. Energías del Hamiltoniano del modelo QTI con bombeo de carga respecto a un periodo completo del parámetro adiabático t	89
4.22. Monopolo y dipolo eléctrico del modelo QTI con bombeo de carga respecto a un periodo completo del parámetro adiabático t	90
4.23. Monopolo, dipolo y cuadrupolo eléctrico del modelo QTI con bombeo de carga respecto a un periodo completo del parámetro adiabático t	91

Resumen

La polarización eléctrica macroscópica es el concepto más esencial en cualquier descripción fenomenológica de los cristales dieléctricos, pero calcular éste y otros momentos multipolares eléctricos en aislantes cristalinos no es un proceso obvio debido al carácter cuántico de la nube electrónica y a la periodicidad de la red cristalina.

En el presente proyecto de titulación estudiaremos como se relacionan los tres primeros momentos multipolares eléctricos en aislantes cristalinos, para lo cual utilizaremos el modelo *tight-binding* SSH (Su-Schrieffer-Heeger), que representa un aislante cristalino de una dimensión, y el modelo *tight-binding* QTI (Quadrupole Topological Insulator), que representa un aislante cristalino de dos dimensiones.

Además, comprobaremos que el modelo unidimensional presenta un dipolo eléctrico cuantizado que genera acumulaciones de carga en los extremos del cristal, mientras que el modelo bidimensional presenta un cuadrupolo eléctrico cuantizado que genera acumulaciones de carga en las esquinas del cristal, así como también polarizaciones en los bordes del material.

Con la finalidad de calcular el momento dipolar eléctrico haremos uso del operador mecánico cuántico de la posición en una dimensión, así como también de un operador análogo en dos dimensiones para calcular el momento cuadrupolar eléctrico.

Finalmente, para comprobar la generalidad de los operadores utilizados en nuestro algoritmo, verificaremos que los tres primeros momentos multipolares en el modelo QTI se comportan tal como lo predice la teoría, incluso cuando el momento cuadrupolar no se encuentra cuantizado.

Abstract

The macroscopic polarization is the most essential concept in any phenomenological description of dielectric materials, but calculating this and other electric multipole moments in crystalline insulators is not an obvious process due to the quantum mechanical behavior of the electron cloud and the periodicity of the lattice.

In this project, we will study how the first three electric multipole moments are related to each other in crystalline insulators. For this purpose, we will use the *tight-binding* SSH (Su-Schrieffer-Heeger) model, that represents a one-dimensional crystalline insulator, and the *tight-binding* QTI (Quadrupole Topological Insulator) model, that represents a two-dimensional crystalline insulator.

We will verify that the one-dimensional model presents a quantized electric dipole moment that generates charge accumulations at the ends of the crystal, while the two-dimensional model presents a quantized electric quadrupole moment that generates charge accumulations at the corners of the crystal, as well as polarizations at its edges.

In order to compute the electric dipole moment we will use the quantum mechanical operator of the position in one dimension, as well as an analogous operator in two dimensions to calculate the electric quadrupole moment.

Finally, to check the generality of the operators used in our algorithm, we will verify that the first three multipole moments in the QTI model behave as predicted by the theory, even when the quadrupole moment is not quantized.

Capítulo 1

Introducción

En este capítulo describiremos el objetivo del presente trabajo de titulación y explicaremos los aspectos teóricos más relevantes que utilizaremos en el resto de capítulos. Además, mencionaremos los resultados más importantes de la teoría moderna de la polarización y explicaremos a breves rasgos el procedimiento para calcular los tres primeros momentos multipolares eléctricos en modelos *tight-binding* de aislantes cristalinos.

1.1. Descripción del problema

La polarización macroscópica es el concepto más esencial en cualquier descripción fenomenológica de los materiales dieléctricos. Por la teoría del electromagnetismo clásico sabemos que dicha polarización induce cargas ligadas en la superficie del material dieléctrico, dadas por la densidad de carga

$$\sigma_b = \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{P}, \quad (1.1)$$

donde $\hat{\mathbf{n}}$ representa el vector unitario de la normal a la superficie y \mathbf{P} la polarización, es decir el momento dipolar por unidad de volumen.

En el presente trabajo de titulación deseamos entender esta relación entre la carga eléctrica inducida y el momento multipolar que la induce, pero en aislantes cristalinos. Esto no es un proceso obvio debido a la periodicidad de la red cristalina y al comportamiento cuántico de sus electrones.

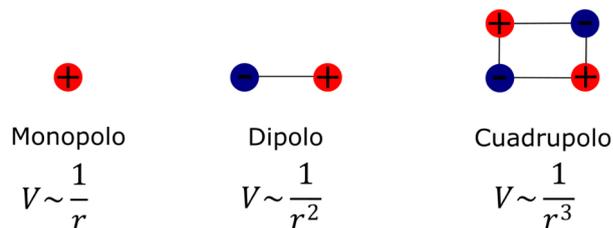


FIGURA 1.1: Multipolos eléctricos con sus respectivos decaimientos de potencial

La teoría moderna de la polarización, desarrollada desde finales del siglo XX, consideraba que un aislante cristalino solo podía presentar dipolo eléctrico, pero ahora sabemos que dicha teoría estaba incompleta, pues los aislantes cristalinos también pueden poseer cuadrupolo eléctrico [1]. El objetivo del presente trabajo de titulación es estudiar la relación entre los tres primeros momentos multipolares eléctricos en modelos *tight-binding* de aislantes cristalinos.

1.2. Relación entre los momentos multipolares eléctricos

Para comprender mejor la relación entre los momentos multipolares eléctricos dividiremos la teoría de este capítulo en dos partes, una clásica y una cuántica. En la parte clásica se recordará la expansión multipolar y se realizará una descomposición de la carga eléctrica en las contribuciones por parte del dipolo y del cuadrupolo eléctrico. En la parte cuántica se explicará el procedimiento para calcular el monopolo y el dipolo eléctrico en sistemas cristalinos.

1.2.1. Expansión multipolar

La expansión multipolar es utilizada para calcular de forma aproximada los potenciales a largas distancias. Si tenemos una distribución de carga lejana, lucirá como una carga puntual, y el potencial corresponderá a $(1/4\pi\epsilon_0)Q/r$, donde Q es la carga total. Pero estamos interesados en estudiar el caso particular cuando $Q = 0$, donde obviamente el potencial será aproximadamente cero. Sin embargo, buscamos un poco más de información que eso, es decir deseamos saber que tan pequeño es ese potencial.

Como veremos en la expansión multipolar, el potencial para un dipolo es proporcional a $1/r^2$ para un r grande, dado que decae más rápido que el potencial

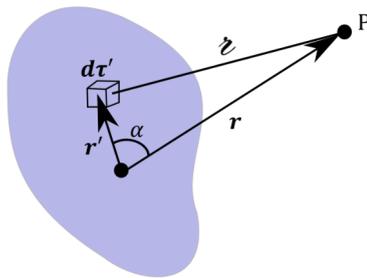


FIGURA 1.2: Distribución de carga que genera un potencial eléctrico $V(\mathbf{r})$ en el punto P .

de una carga puntual, el cual es proporcional a $1/r$. Mientras que si juntamos un par de dipolos iguales y opuestos obtendremos un cuadrupolo con potencial proporcional a $1/r^3$ y así sucesivamente, como se observa en la fig. 1.1.

A continuación, desarrollaremos una expansión del potencial para cualquier distribución de carga localizada en potencias de $1/r$, como se muestra en la ref. [2]. La fig. 1.2 define las variables relevantes. El potencial en \mathbf{r} está dado por

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{1}{z} \rho(\mathbf{r}') d\tau'. \quad (1.2)$$

Con el fin de expandir el potencial necesitamos descomponer el término $\frac{1}{z}$, para lo cual utilizaremos ley de cosenos,

$$z^2 = r^2 + (r')^2 - 2rr' \cos \alpha = r^2 \left[1 + \left(\frac{r'}{r}\right)^2 - 2\left(\frac{r'}{r}\right) \cos \alpha \right], \quad (1.3)$$

donde α es el ángulo entre \mathbf{r} y \mathbf{r}' . Por lo tanto, tenemos

$$z = r\sqrt{1 + \epsilon} \quad (1.4)$$

con

$$\epsilon = \left(\frac{r'}{r}\right) \left(\frac{r'}{r} - 2 \cos \alpha\right). \quad (1.5)$$

Para puntos fuera de la distribución de carga, ϵ es mucho menor a 1, por lo tanto, podemos utilizar el teorema binomial

$$(a + b)^2 = a^2 + 2ab + \frac{n(n+1)}{2} a^{n-2} b^2. \quad (1.6)$$

Por consiguiente al aplicar la ec. 1.6 en la ec. 1.4 podremos descomponer el término $1/z$

$$\frac{1}{z} = \frac{1}{r}(1 + \epsilon)^{-1/2} = \frac{1}{r} \left(1 - \frac{1}{2}\epsilon + \frac{3}{8}\epsilon^2 + \frac{5}{16}\epsilon^3 + \dots \right). \quad (1.7)$$

Si escribimos ϵ en función de r , r' y α usando la ec. 1.5 y agrupando los términos en potencias de $\left(\frac{r'}{r}\right)$

$$\begin{aligned} \frac{1}{z} = \frac{1}{r} \left[1 + \left(\frac{r'}{r}\right) (\cos \alpha) + \left(\frac{r'}{r}\right)^2 \left(\frac{3 \cos^2 \alpha - 1}{2}\right) \right. \\ \left. + \left(\frac{r'}{r}\right)^3 \left(\frac{5 \cos^3 \alpha - 3 \cos \alpha}{2}\right) + \dots \right], \quad (1.8) \end{aligned}$$

obtenemos los coeficientes (en paréntesis) que corresponden a los polinomios de Legendre, escritos por la Fórmula de Rodriguez

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} [(x^2 - 1)^n]. \quad (1.9)$$

Obteniendo así una expresión para escribir el término $1/z$ en función de los polinomios de Legendre

$$\frac{1}{z} = \frac{1}{r} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{r'}{r}\right)^n P_n(\cos \alpha). \quad (1.10)$$

Substituyendo la ec. 1.10 en la ec. 1.2 y notando que r es constante dentro de la integral, el potencial podrá ser escrito en función de los polinomios de Legendre

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{r^{(n+1)}} \int (r')^n P_n(\cos \alpha) \rho(\mathbf{r}') d\tau', \quad (1.11)$$

o de manera explícita

$$\begin{aligned} V(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{1}{r} \int \rho(\mathbf{r}') d\tau' + \frac{1}{r^2} \int (r') \cos \alpha \rho(\mathbf{r}') d\tau' \right. \\ \left. + \frac{1}{r^3} \int (r')^2 \left(\frac{3}{2} \cos^2 \alpha - \frac{1}{2}\right) \rho(\mathbf{r}') d\tau' + \dots \right] \quad (1.12) \end{aligned}$$

La expansión multipolar de $V(\mathbf{r})$ en potencias de $(1/r)$ nos permite escribir el potencial como la suma de la contribución monopolar ($n = 0$), dipolar ($n = 1$), cuadrupolar ($n = 2$) y así sucesivamente

$$V(\mathbf{r}) = V_{\text{mon}}(\mathbf{r}) + V_{\text{dip}}(\mathbf{r}) + V_{\text{cuad}}(\mathbf{r}). \quad (1.13)$$

Por lo tanto tomando el primer término de la ec. 1.12 obtendremos la contribución del monopolo Q

$$V_{\text{mon}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q}{r}, \quad (1.14)$$

donde el momento monopolar $Q = \int \rho d\tau$ corresponde a la carga total de la configuración. Tomando el segundo término de ec. 1.12 obtendremos la contribución del dipolo \mathbf{p}

$$V_{\text{dip}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{p} \cdot \hat{\mathbf{r}}}{r^2}, \quad (1.15)$$

donde el momento dipolar $\mathbf{p} = \sum q_i \mathbf{r}'_i$ es la suma de una colección de cargas puntuales por sus respectivas posiciones.

De igual manera si tomamos el tercer término de ec. 1.12 obtendremos la contribución del cuadrupolo q_{ij}

$$V_{\text{cuad}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\sum \hat{\mathbf{r}}_i \hat{\mathbf{r}}_j q_{ij}}{r^3}, \quad (1.16)$$

donde el cuadrupolo q_{ij} representa a un tensor de segundo rango $q_{ij} = \frac{1}{2} \int [3r'_i r'_j - (r')^2 \delta_{ij}] \rho(\mathbf{r}') d\tau'$.

Debido a que los modelos que estudiaremos en este proyecto presentan hasta dos dimensiones (x, y) , podemos escribir finalmente el monopolo, el dipolo y el cuadrupolo como

$$Q^{\text{tot}} = \sum q_i \quad (1.17)$$

$$p_x = \sum q_i x_i \quad p_y = \sum q_i y_i \quad (1.18)$$

$$q_{xx} = \sum q_i x_i^2 \quad q_{xy} = \sum q_i x_i y_i \quad (1.19)$$

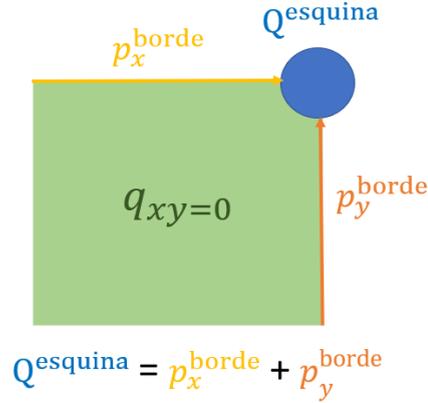


FIGURA 1.3: Esquema de aislante cristalino sin cuadrupolo interno q_{xy} . Donde la acumulación de carga en la esquina Q^{esquina} se produce debido a un par de polarizaciones superficiales convergentes p^{borde} .

1.2.2. Contribuciones del dipolo y del cuadrupolo a la carga eléctrica

Además del desarrollo clásico de la expansión multipolar también podemos descomponer clásicamente la carga eléctrica en las contribuciones por parte del dipolo y del cuadrupolo eléctrico, para lo cual a continuación se presentan derivaciones que siguen de manera muy cercana los desarrollos matemáticos realizados por Benalcazar, Bernevig y Hugues en 2017 [3].

Por medio de la ec. 1.1 sabemos que la polarización eléctrica induce una carga eléctrica superficial, por lo tanto, en un material bidimensional que solo posea polarizaciones en su superficie que converjan en una esquina, la acumulación de carga en dicha esquina deberá ser igual a la suma las polarizaciones superficiales, es decir $Q^{\text{esquina}} = p_x^{\text{borde}} + p_y^{\text{borde}}$, como se observa en la fig. 1.3. Sin embargo esto no ocurre si el material posee un momento cuadrupolar en su interior, en este caso la magnitud de la carga en la esquina será igual a la magnitud de dichas polarizaciones, es decir: $Q^{\text{esquina}} = p_x^{\text{borde}} = p_y^{\text{borde}} \neq p_x^{\text{borde}} + p_y^{\text{borde}}$, como se observa en la fig. 1.4, tal como se demostrará a continuación.

Consideremos un material aislante neutro de dos dimensiones, sin carga libre en su interior o en su frontera. Por lo que toda acumulación de carga será inducida por el momento dipolar o el momento cuadrupolar.

En la fig. 1.3, hay una acumulación de carga donde dos polarizaciones superficiales convergen en una esquina. Estos dipolos superficiales son el resultado de un efecto superficial puro y no debido a un momento en el interior del material.

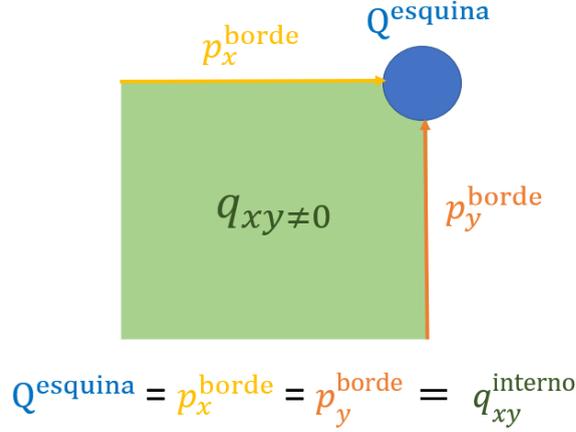


FIGURA 1.4: Esquema de aislante cristalino con cuadrupolo interno q_{xy} . Donde la acumulación de carga en la esquina Q_{esquina} se produce debido al momento cuadrupolar interno q_{xy} , el mismo que también induce polarizaciones en la superficie del material p^{borde} .

En la fig. 1.4, hay dos polarizaciones superficiales y acumulación de carga, pero debidas exclusivamente al momento cuadrupolar interno.

Por lo tanto surge la necesidad de distinguir los efectos debido a la superficie en la fig. 1.3 o los debidos al interior del material en la fig. 1.4. Para ser explícitos, consideramos solo la existencia de momentos dipolares localizados en el frontera.

Por electromagnetismo clásico sabemos que la contribución a la densidad de carga debida a la densidad del momento dipolar $\mathbf{p} = \mathbf{p}(\mathbf{r})$ es

$$\sigma = \mathbf{p} \cdot \mathbf{n} \quad (1.20)$$

$$\rho = -\nabla \cdot \mathbf{p}, \quad (1.21)$$

siendo el último término la densidad de carga inducida por la polarización por unidad de volumen del material, y $\mathbf{p} \cdot \mathbf{n}$ la densidad de carga por unidad de área en una superficie frontera con vector unitario normal \mathbf{n} inducida por la polarización \mathbf{p} en el interior.

Con el propósito de calcular la carga acumulada, consideremos una área ν , la cual encierra a la esquina en donde la carga se acumula. Dicha carga puede ser escrita integrando todas las contribuciones de la densidad de carga

$$Q = \int_{\nu} \rho d\nu. \quad (1.22)$$

Para relacionar la carga inducida en este volumen con la polarización en su frontera, usaremos la ec. 1.21

$$Q^{\text{esquina}} = \int_{\nu} \rho d\nu = \int_{\nu} (-\nabla \cdot \mathbf{p}) d\nu. \quad (1.23)$$

Ahora aplicando el teorema de Stokes: $\int_S \mathbf{F} \cdot d\mathbf{S} = \int_V \nabla \cdot \mathbf{F} dV$ tenemos

$$Q^{\text{esquina}} = \int_{\nu} (-\nabla \cdot \mathbf{p}) d\nu = - \oint_{\partial\nu} \mathbf{p} \cdot d\mathbf{s}, \quad (1.24)$$

donde $\partial\nu$ es la frontera del área ν . Como vemos en la fig. 1.3 los dipolos $\mathbf{p}_x = \mathbf{p}_1$ y $\mathbf{p}_y = \mathbf{p}_2$ se encuentran ubicados en la frontera de ν . Por lo tanto si tratamos a estas polarizaciones como si estuvieran completamente localizadas en el borde, podemos escribir

$$\mathbf{p}_1(\mathbf{r}) = \hat{x} p_1 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \quad (1.25)$$

$$\mathbf{p}_2(\mathbf{r}) = \hat{y} p_2 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2), \quad (1.26)$$

donde r_1 and r_2 son el punto límite de la esquina en x y en y respectivamente.

Finalmente tomando en cuenta que la frontera $\partial\nu$ tiene el vector de la normal $-\hat{x}$ en \mathbf{r}_1 y $-\hat{y}$ en \mathbf{r}_2 , tenemos

$$Q^{\text{esquina}} = p_1 + p_2. \quad (1.27)$$

Ahora en cambio por contraste, consideremos ahora la acumulación dentro del área ν debida al momento cuadrupolar q_{xy} , como se muestra en la fig. 1.4. En este caso, como se demuestra en la ref. [3], la carga inducida es

$$\rho = \frac{1}{2} \partial_j \partial_i q_{ij}, \quad (1.28)$$

donde la suma se aplica para índices repetidos. La región interna (área verde) tiene una densidad de cuadrupolo $q_{xy} = q_{yx} \neq 0$, afuera de esta región hay vacío. Por lo tanto, la carga total encerrada en la área ν será

$$Q^{\text{esquina}} = \int_{\nu} \rho d\nu = \int_{\nu} \left(\frac{1}{2} \partial_j \partial_i q_{ij} \right) d\nu. \quad (1.29)$$

Y aplicando nuevamente el teorema de Stokes se obtiene

$$Q^{\text{esquina}} = \int_{\nu} \left(\frac{1}{2} \partial_j \partial_i q_{ij} \right) d\nu = \frac{1}{2} \oint_{\partial\nu} (\partial_i q_{ij}) n_j ds. \quad (1.30)$$

Aquí, n_j es la j -ava componente del vector unitario \hat{n} normal a la frontera $\partial\nu$. Dado que la densidad del momento cuadrupolar es contante, solo hay dos lugares en $\partial\nu$ donde la derivada $\partial_i q_{ij}$ no desaparece: (i) en r_1 , el vector unitario normal a la frontera $\partial\nu$ y que apunta lejos del área ν , es $\hat{n} = -\hat{x}$, por lo tanto $\int_{-\epsilon}^{\epsilon} \partial_y q_{xy} dy = -q_{yx}$, además (ii) en r_2 , el vector unitario normal a la frontera $\partial\nu$ y que apunta lejos del area ν , es $\hat{n} = -\hat{y}$, por lo tanto $\int_{-\epsilon}^{\epsilon} \partial_x q_{xy} dx = -q_{xy}$. Por lo tanto, la carga en la esquina es

$$Q^{\text{esquina}} = \frac{1}{2} (q_{xy} + q_{yx}) = q_{xy}. \quad (1.31)$$

Si comparamos la ec. 1.27 con la ec. 1.31, podemos concluir que, en el caso de que el material solo posea momentos dipolares libres localizados en la frontera, la carga localizada en la esquina estará dada por la suma de las polarizaciones superficiales convergentes, mientras que en el caso de que el material posea un momento cuadrupolar interno, la magnitud de la carga en la esquina coincidirá con la magnitud del momento cuadrupolar. Dado que las polarizaciones superficiales inducidas por el cuadrupolo interno tienen la misma magnitud del cuadrupolo, al añadir las dos polarizaciones superficiales estaríamos sobrecontando la carga en la esquina. Heurísticamente, las dos polarizaciones superficiales comparten la carga en la esquina cuando tenemos momento cuadrupolar, o ambas polarizaciones contribuyen independientemente a la carga en la esquina si solo tenemos polarizaciones superficiales libres. En resumen, incluso cuando en ambos casos (fig. 1.3 y fig. 1.4) tenemos polarizaciones localizadas en las fronteras convergiendo en una esquina del material, la carga resultante en la esquina no está determinada siempre de la misma manera respecto a estas polarizaciones superficiales. Por ejemplo, si establecemos que $p_1 = p_2 = q_{xy}$ tal que las magnitudes de las polarizaciones superficiales coincidan en ambos casos, el caso de las polarizaciones superficiales convergentes (ec. 1.27) nos da una carga en la esquina $Q^{\text{esquina}} = 2q_{xy}$, mientras en el caso de tener un momento cuadrupolar uniforme obtenemos una carga en la esquina $Q^{\text{esquina}} = q_{xy}$.

Ahora generalizando las relaciones entre los momentos en las fronteras y el momento en el interior junto con sus cargas asociadas en la frontera. En 1D, la diferencia entre la carga total en un extremo del sistema y la carga libre (momento monopolar) ligada a este extremo es igual al momento dipolar

$$Q^{\text{extremo}} - Q^{\text{libre}} = p_x. \quad (1.32)$$

Mientras que en 2D, la diferencia entre la carga total en la esquina y la carga debido a las contribuciones de las polarizaciones superficiales está determinada por el momento cuadrupolar interno

$$Q^{\text{esquina}} - p_x^{\text{borde}} - p_y^{\text{borde}} = -q_{xy}. \quad (1.33)$$

Esta última ecuación será utilizada en el capítulo 3 para calcular el momento cuadrupolar q_{xy} reemplazando los valores de la acumulación de carga y de las polarizaciones superficiales encontradas por medio de la simulación. Es decir, el presente trabajo de titulación consistirá en calcular de manera analítica el cuadrupolo eléctrico y de manera numérica el monopolo y el dipolo eléctrico haciendo uso de la mecánica cuántica y de la teoría moderna de la polarización, como veremos a continuación.

1.2.3. Cálculo del monopolo eléctrico en la mecánica cuántica

En física cuántica el estado de una partícula es descrito por la función de onda $\phi(\mathbf{r}, t)$ la cual describe las propiedades ondulares de dicha partícula. Para discutir los efectos cuánticos se suele utilizar la amplitud de la función ϕ , cuyo el módulo al cuadrado $|\phi|^2$ que es igual a la intensidad de la onda asociada con este efecto cuántico. La intensidad de la onda en un punto dado del espacio es proporcional a la probabilidad de encontrar, en ese punto, a la partícula material a la que corresponde la onda.

En 1927 Born interpretó $|\phi|^2$ como la densidad de probabilidad y $|\phi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r$ como la probabilidad $dP(\mathbf{r}, t)$, de encontrar a la partícula en el tiempo t en el elemento de volumen d^3r localizado entre \mathbf{r} y $\mathbf{r} + d\mathbf{r}$

$$|\phi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r = dP(\mathbf{r}, t). \quad (1.34)$$

En nuestro caso las funciones de onda ψ^{elec} que utilizaremos pertenecen a los electrones, debido a que son obtenidas por medio de la diagonalización del Hamiltoniano del sistema. Además dado que nuestro trabajo se enfoca en aislantes

cristalinos, no todos los estados estarán ocupados, solo tendremos N_{occ} estados ocupados hasta el nivel de Fermi.

Por lo tanto escribiendo de forma discreta la ec. 1.34 y sumando solo los vectores propios de los estados ocupados, obtendremos la densidad de carga eléctrica

$$\rho^{\text{elec}} = \sum_{i=1}^{N_{\text{occ}}} |\psi_i^{\text{elec}}|^2, \quad (1.35)$$

que al multiplicarla por la carga eléctrica fundamental e nos dará como resultado el monopolo eléctrico o carga eléctrica total del sistema

$$Q^{\text{tot}} = \rho^{\text{elec}} e = \sum_{i=1}^{N_{\text{occ}}} |\psi_i^{\text{elec}}|^2 e. \quad (1.36)$$

1.2.4. Cálculo del dipolo eléctrico de acuerdo a la teoría moderna de la polarización

Como hemos visto hasta ahora el cálculo del cuadrupolo y del monopolo son relativamente directos, ya que solo utilizamos un desarrollo clásico para el cálculo analítico del cuadrupolo y la interpretación de Copenhague para el cálculo numérico del monopolo. Sin embargo, el cálculo del dipolo eléctrico en sistemas cristalinos no es tan directo y calcularlo numéricamente será el principal objetivo del presente trabajo.

El problema es que definir la polarización en sistemas cristalinos no es un proceso obvio debido al comportamiento cuántico del sistema electrónico, ya que la nube electrónica no puede ser descompuesta en entidades localizadas. Este problema fue resuelto a finales del siglo XX por medio de un nuevo formalismo teórico que involucra cantidades como las fases de Berry y las funciones de Wannier. Dicho formalismo es ahora conocido como la teoría moderna de la polarización.

En 1983, Berry [4] demostró que en un sistema cuántico al transportar (paralelamente) un estado propio alrededor de un circuito cerrado C , éste adquirirá un factor de fase geométrico ($e^{i\gamma(C)}$). A esta fase γ se la conoce ahora como fase de Berry.

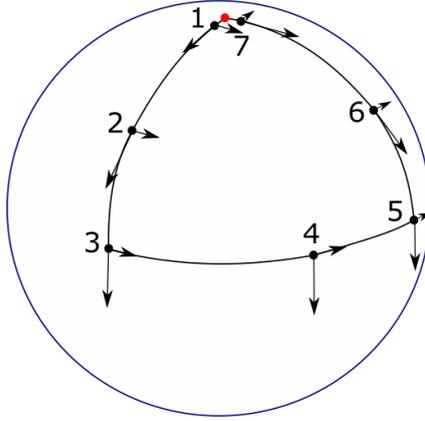


FIGURA 1.5: Transporte paralelo a través de una esfera

Para ilustrar mejor este concepto imaginemos que estamos en el polo norte del planeta y cargamos con nosotros un eje de coordenadas, a continuación, procedemos a realizar un viaje manteniendo siempre el eje de coordenadas paralelo, de modo que cuando volvamos a nuestro punto de partida observaremos que nuestro eje de coordenadas ha rotado, como se observa en la fig. 1.5. Esta rotación corresponde a la curvatura del manifold, es decir a la curvatura de la tierra en nuestro caso.

Por lo tanto, cualquier vector que sea transportado paralelamente a través de un circuito cerrado, al volver al punto de partida terminará rotado respecto a su dirección inicial.

Esta falla para regresar al vector inicial está descrita por la holonomía, la cual es una consecuencia geométrica de la curvatura que se encarga de medir como el transporte paralelo alrededor de un lazo cerrado no preserva la información geométrica transportada.

Berry se dio cuenta que en la mecánica cuántica ocurre algo similar, pero en este caso lo que rota es la fase de la onda mecánico-cuántica y demostró además que estas fases representan observables físicos.

También se puede observar un circuito cerrado en la zona de Brillouin de un cristal. Dado que un sistema cristalino presenta invarianza traslacional, tendrá una zona de Brillouin periódica, es decir el punto inicial será igual al punto final y en vez de formar una línea, formará un círculo. Gracias a esto, Zak en 1988 [5] se dio cuenta que de manera análoga el vector transportado en este caso corresponderá a la función de onda electrónica y por lo tanto las fases de Berry estarán relacionadas con las posiciones de los electrones.

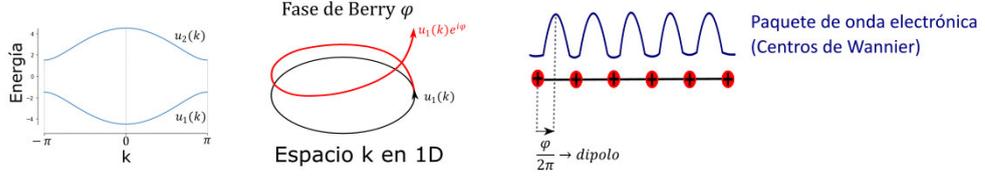


FIGURA 1.6: 1) Bandas de energía de un aislante, donde u_1 es la función de onda de los estados ocupados y u_2 de los desocupados. 2) Fase resultante de una vuelta completa de la función de onda de los estados ocupados u_1 . 3) Dicha fase es proporcional a las posiciones electrónicas y por tanto al dipolo eléctrico del material.

Por la teoría del estado sólido sabemos que las funciones de ondas electrónicas de un cristal pueden ser descritas por las funciones de Bloch

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.37)$$

donde $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ representa una función periódica cualquiera, cuya periodicidad \mathbf{R} es la misma que la de la red cristalina, de modo que $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$.

Además, a las funciones de onda electrónicas se las puede etiquetar según su banda de energía n , y dado que trabajaremos con aislantes cristalinos se deberá cumplir la ecuación de Schrödinger tanto para la banda ocupada ($n = 1$) como para la desocupada ($n = 2$)

$$h(\mathbf{k}) |u_{1,2}(\mathbf{k})\rangle = \epsilon_{1,2} |u_{1,2}(\mathbf{k})\rangle. \quad (1.38)$$

Dado que el aislante presenta el nivel de Fermi en medio de la banda prohibida o *gap* energético, debajo del nivel de Fermi tendremos los estados ocupados (primera banda $n = 1$) y arriba del nivel de Fermi tendremos los estados desocupados (segunda banda $n = 2$). Zak se dio cuenta que si trasladamos la onda mecánico-cuántica de los estados ocupados $u_1(k)$ a lo largo de la zona de Brillouin, al regresar al punto inicial, la onda presentará una fase (de Berry) que será proporcional a los desplazamientos de los centros de carga negativa (centros de Wannier), por lo tanto la fase de Berry será proporcional al dipolo formado en el aislante cristalino, como se observa en la fig. 1.6.

En 1993, Vanderbilt y King-Smith [6] demostraron que la polarización en aislantes cristalinos puede ser escrita como la suma de las fases de Berry de las M bandas ocupadas

$$P_{\text{elec}} \approx \sum_n^M \gamma_n, \quad (1.39)$$

lo cual es el resultado central de la teoría moderna de la polarización y donde la fase de Berry está definida como una integral sobre un manifold cerrado C (la zona de Brillouin en este caso)

$$\gamma_n = \int_C \langle u_{n\mathbf{k}} | i \nabla_{\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle. \quad (1.40)$$

Debido a que nuestro trabajo se enfocará en el espacio real, no ahondaremos en los aspectos relacionados al espacio del momento. Sin embargo, de manera heurística se puede ver porque la polarización se la puede escribir en términos de las fases de Berry. Debido a que la polarización está dada por los desplazamientos de los electrones, recordemos que en la mecánica cuántica el operador del momento está definido como $\hat{P}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ y dado que el conmutador posición-momento esta dado por $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$, esto nos lleva a escribir el operador posición como $\hat{r} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} = i \frac{\partial}{\partial k}$, por lo tanto el valor esperado de la posición es $\langle \hat{x} \rangle = \langle u_1(\mathbf{k}) | i \partial_k | u_1(\mathbf{k}) \rangle$ y como podemos observar dicha expresión es similar a la fase de Berry (ec. 1.40).

Los estados de Bloch con distinto vector de onda son automáticamente ortogonales incluso si los orbitales atómicos subyacentes no los son. Por lo tanto, uno podría preguntarse si es posible utilizar los estados de Bloch para trabajar al revés y derivar los orbitales locales que sean realmente ortogonales entre sí. Esto fue conseguido por Gregory Wannier, en honor al cual se nombraron a estos orbitales. La función de Wannier, $W_n(\mathbf{r})$, en la celda unitaria \mathbf{R} con volumen V asociada con la banda n está definida como

$$W_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{BZ} d^3\mathbf{k} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{BZ} d^3\mathbf{k} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{R})} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (1.41)$$

Las funciones de Wannier forman un conjunto completo de funciones ortogonales, ampliamente utilizadas en física del estado sólido debido a que representan los orbitales moleculares localizados de sistemas cristalinos. Las funciones de Wannier representan orbitales localizados en sistemas con condiciones de borde periódicas (PBC) y son relevantes en nuestro estudio ya que su naturaleza localizada provee una descripción de la densidad de carga en un sólido convenientemente similar a la de una partícula puntual, aunque en realidad sabemos que la densidad de carga en un sólido es una función continua.

Cabe señalar que la teoría moderna de la polarización [7] nos muestra que la polarización en aislantes cristalinos puede ser escrita en términos de las fases de Berry cuando se trabaja en el espacio del momento (espacio recíproco) y en términos de los centros de carga negativa de las funciones de Wannier cuando se trabaja en el espacio real. Es decir, es completamente análogo utilizar funciones de Bloch (que definen a las fases de Berry) en el espacio recíproco y emplear funciones de Wannier en el espacio real, es más, las funciones de Bloch se pueden escribir en términos de las funciones de Wannier y viceversa.

Sin embargo, en el presente trabajo de titulación utilizaremos solamente el espacio real para realizar nuestros cálculos, ya que a diferencia de las funciones de Bloch que están deslocalizadas en el espacio, las funciones de Wannier están localizadas y esta característica nos permite seguir calculando los momentos dipolares por medio de la suma de las cargas multiplicadas por su posición.

Al intentar reducir la integral de la polarización a una suma sobre las cargas localizadas por sus posiciones, debemos notar que la escala de energía necesaria para excitar un núcleo fuera de su estado base es alrededor de seis ordenes de magnitud mayor a las escalas de energía típicas. Es por esto que casi siempre en física de materia condensada al ion (núcleo atómico) se lo trata como una partícula puntual inerte que posee solo grados de libertad traslacionales, pero para los electrones el proceso no es tan simple debido a su comportamiento cuántico (nube electrónica).

Esto se soluciona gracias a la localización de las funciones de Wannier, ya que podemos obtener la posición promedio de los electrones en la función de Wannier y tratarlos como si todos estuvieran sobre esa posición, dicha posición se la conoce como centro de Wannier $\bar{\mathbf{r}}_n$.

El centro de Wannier asociado a la banda n está definido como el valor esperado del operador posición \mathbf{r} para la función de Wannier $W_n(\mathbf{r})$

$$\bar{\mathbf{r}}_n = \langle \mathbf{r}_n \rangle = \int W_n^*(\mathbf{r})\mathbf{r}W_n(\mathbf{r})d^3\mathbf{r}. \quad (1.42)$$

Es decir, el formalismo de las funciones de Wannier nos permite continuar escribiendo la polarización eléctrica como la suma de las cargas por sus posiciones, la misma que está dada por la contribución de los electrones de valencia con carga negativa, considerando el centro de Wannier como la “posición” de dichos electrones. En 1998 Resta [8] simplificó el problema encontrando una manera de obtener

dichos centros $\bar{\mathbf{r}}_n$ sin necesidad de manipular las funciones de Wannier, como veremos a continuación.

1.2.4.1. Operador mecánico cuántico de la posición en sistemas extendidos

Debido a que la polarización eléctrica está dada por el desplazamiento de los electrones respecto a sus núcleos, necesitaremos definir el operador de la posición de los electrones y posteriormente obtener su valor esperado, ya que la polarización es un observable físico. Sin embargo, el operador de posición, definido según la representación de Schrödinger de la forma estándar como la suma de las posiciones de los N electrones que conforman el sistema

$$\hat{X} = \sum_{i=1}^N x_i \quad (1.43)$$

pierde su utilidad cuando la función de onda adopta condiciones de borde periódicas (PBC), ya que el valor esperado de este operador no puede ser evaluado si la función de onda obedece PBC, dado que \hat{X} no conmuta con una traslación L , siendo L la longitud del cristal.

Fue Resta en 1998 [8] quién solucionó este problema, definiendo el valor esperado de la posición por medio de un operador simple que actúa sobre todos los electrones del sistema. Resta codificó las posiciones electrónicas dentro de las fases de un nuevo operador

$$\langle X \rangle = \frac{L}{2\pi} \text{Im} \ln \left\langle \psi_0 \left| e^{i\frac{2\pi}{L}\hat{X}} \right| \psi_0 \right\rangle, \quad (1.44)$$

de modo que el valor esperado del operador posición sea compatible con condiciones de borde periódicas, esto es fácil de comprobar ya que si analizamos el término en medio del bra-ket para la primera y última posición de una red cristalina unidimensional de longitud L , obtenemos el mismo valor para ambos casos: $e^{i\frac{2\pi}{L}0} = e^{i\frac{2\pi}{L}L} = 1$.

Por la teoría del electromagnetismo sabemos que en los materiales dieléctricos se produce una densidad de corriente $j(t)$ que corresponde al movimiento neto de los momentos dipolares eléctricos por unidad de volumen (Polarización \mathbf{P}) y que está dada por

$$j(t) = \frac{\partial \mathbf{P}(t)}{\partial t}. \quad (1.45)$$

Resta demostró justamente que la derivada temporal de $\langle X \rangle$ coincide con la corriente eléctrica adiabática que recorre a través del sistema cuando el Hamiltoniano contiene un término dependiente del tiempo que varía lentamente. De este modo Resta pudo comprobar que la polarización macroscópica se puede escribir como el límite termodinámico ($L \rightarrow \infty$) de una expresión que involucra al valor esperado del operador posición

$$P_{\text{elec}} = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{e}{2\pi} \text{Im} \ln \left\langle \psi_0 \left| e^{i \frac{2\pi}{L} \hat{X}} \right| \psi_0 \right\rangle. \quad (1.46)$$

La ec. 1.46 nos permite calcular la polarización eléctrica sin necesidad de realizar la integral en el espacio recíproco y nos evita también manipular las funciones de Wannier, debido a que solo hace uso de los centros de carga negativa (centros de Wannier) de dichas funciones.

1.3. Contenido del Trabajo de Titulación

El presente trabajo de titulación se compone del estudio de dos modelos *tight-binding* de aislantes cristalinos. En el Capítulo 2 estudiaremos el modelo SSH (por sus autores: Su, Schrieffer y Heeger) que consiste en un aislante cristalino unidimensional que posee un momento dipolar cuantizado que genera acumulación de carga en sus extremos. Este modelo lo utilizaremos para introducir ciertos conceptos fundamentales y también para calcular numéricamente su monopolo y dipolo eléctrico.

En el Capítulo 3 estudiaremos el modelo QTI (por sus iniciales en inglés: Quadrupole Topological Insulator) que consiste en un aislante cristalino bidimensional cuyo interior no posee un momento dipolar pero sí un momento cuadrupolar cuantizado. Este momento cuadrupolar induce polarizaciones superficiales (en los bordes del material), junto con acumulaciones de carga en las esquinas del cristal. En este modelo calcularemos el monopolo y el dipolo eléctrico en las fronteras de forma numérica y con estos resultados calcularemos de forma analítica el momento cuadrupolar interno haciendo uso de la ec. 1.33.

Además utilizaremos el bombeo adiabático de carga propuesto por Thouless en 1983 [9], introduciendo un parámetro adiabático en el Hamiltoniano del modelo SSH para observar el transporte electrónico de forma explícita y también introduciremos este parámetro en el Hamiltoniano del modelo QTI para romper las simetrías que cuantizan el momento cuadrupolar y comprobar así que nuestro algoritmo funciona de forma genérica, es decir incluso cuando el momento cuadrupolar no se encuentra cuantizado.

En el Capítulo 4 se muestran los resultados del trabajo. Finalmente, en el Capítulo 5 expondremos las conclusiones obtenidas del proyecto de titulación.

Capítulo 2

Modelo *tight-binding* SSH de un aislante cristalino unidimensional

En este capítulo explicaremos los fundamentos del modelo SSH, realizando primero un análisis teórico del modelo e indicando después los pasos correctos para su implementación numérica. También utilizaremos este modelo para explicar de manera sencilla los procedimientos más importantes de este proyecto, como son: el cálculo de la carga eléctrica y el cálculo de las posiciones electrónicas (centros de Wannier). Finalmente explicaremos el procedimiento para realizar un bombeo de carga electrónica con la finalidad de observar el movimiento de los centros de Wannier durante una evolución adiabática, es decir, para observar el transporte adiabático electrónico de forma explícita.

2.1. Descripción del modelo unidimensional SSH

En este capítulo abordaremos el modelo *tight-binding* propuesto por Su, Schrieffer y Heeger (SSH model) en el año 1979 [10], el cual representa a un aislante cristalino unidimensional con 2 sitios de red (2 átomos) por celda unitaria, pero con un solo electrón por cada celda unitaria, ya que esto corresponde a una red cristalina media llena (*half filling*), condición necesaria para asegurar la neutralidad del material. El modelo SSH presenta una red cristalina con N celdas unitarias, es decir con $2N$ sitios de red y por consiguiente tendrá $2N$ estados totales, de los cuales solo estarán ocupados la mitad, es decir, por debajo del nivel de Fermi estarán los N primeros estados del sistema y por lo tanto en este modelo se cumple que $N_{\text{occ}} = N$. Además, dado que estamos considerando electrones sin espín, el

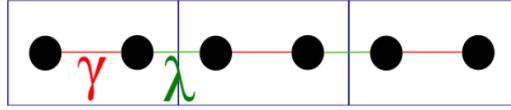


FIGURA 2.1: Modelo *tight-binding* SSH de un aislante cristalino unidimensional compuesto de 2 sitios por celda unitaria, con N celdas unitarias ($N = 3$) y con amplitudes de transición intra-cell γ e inter-cell λ .

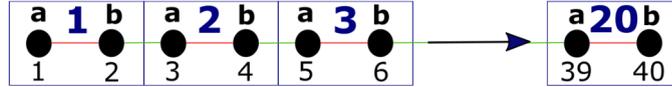


FIGURA 2.2: Modelo *tight-binding* SSH con $N = 20$ celdas unitarias. Donde los sitios de cada celda unitaria se los enumera de derecha a izquierda, por lo tanto los átomos de las fronteras corresponden al sitio 1 y 40.

único grado de libertad que tienen los electrones es saltar de un sitio de red a otro, siempre que estos sean contiguos. De modo que podemos escribir γ como la amplitud de probabilidad de transición del electrón dentro de la misma celda unitaria (intra-cell) y λ como la amplitud de probabilidad de transición del electrón entre celdas unitarias contiguas (inter-cell), como se observa la fig. 2.1, donde ambas amplitudes de los hoppings (conexiones) tienen unidades de electronvoltios. Es decir, el modelo SSH describe una cadena con alternancia de enlaces fuertes y débiles entre los átomos, como la molécula del poliacetileno.

En el análisis de este modelo consideraremos al primer átomo como a y al segundo como b , sin embargo también podríamos enumerarlos al revés sin que esto afecte los resultados posteriores. Además con el fin de acercarnos a los resultados exactos necesitamos utilizar un número de celdas unitarias N elevado, es más, si recordamos la ecuación de Resta (ec. 1.46) para calcular la polarización se necesita estar en el límite termodinámico, es decir, cuando N tiende a infinito, ya que la longitud del cristal está dada por su número de celdas unitarias N . Sin embargo, como observaremos posteriormente para los modelos que utilizaremos en este trabajo se obtiene los resultados esperados incluso con $N = 10$, por lo tanto utilizaremos un número bajo de celdas unitarias cuando necesitemos explicar algo de forma esquemática y elevaremos el número de celdas unitarias para mostrar los resultados más generales, como se observa en la fig. 2.2.

Para realizar los cálculos en el modelo SSH dentro del espacio real, escribiremos el hamiltoniano haciendo uso de la segunda cuantización. Siendo N el número de celdas unitarias de la cadena y R el contador de las celdas unitarias, de modo que $R = 1, \dots, N$. Primero podemos construir el hamiltoniano considerando que los

electrones solo pasan de derecha a izquierda, es decir, se produce una transición intra-cell (γ) desde b hasta a y una transición inter-cell (λ) desde a hasta b

$$H = \sum_{R=1}^N \gamma a_R^\dagger b_R + \lambda b_R^\dagger a_{R+1}, \quad (2.1)$$

donde a_R^\dagger y b_R son el operador creación en el sitio a y el operador aniquilación en el sitio b , respectivamente, debido a que el electrón que estaba en b , después del salto se encuentra en a .

Pero dado que debemos asegurar la hermiticidad del hamiltoniano tenemos que considerar que los electrones también pueden transitar de izquierda a derecha, es decir a la ec. 2.1 debemos sumarle su conjugado transpuesto ($+c.c$)

$$H = \sum_{R=1}^N \gamma a_R^\dagger b_R + \lambda b_R^\dagger a_{R+1} + \gamma b_R^\dagger a_R + \lambda a_{R+1}^\dagger b_R. \quad (2.2)$$

Para simplificar la expresión anterior podemos agrupar los términos según su hopping intra-cell e inter-cell

$$H = \sum_{R=1}^N \gamma (a_R^\dagger b_R + b_R^\dagger a_R) + \lambda (b_R^\dagger a_{R+1} + a_{R+1}^\dagger b_R). \quad (2.3)$$

Finalmente para implementar la ec. 2.3 denotaremos a H^{intra} como las contribuciones al Hamiltoniano por parte las transiciones del electrón dentro de la misma celda unitaria (intra-cell), tanto para transiciones de izquierda a derecha (left to right (l2r)) como para transiciones de derecha a izquierda (r2l). De igual manera las contribuciones al Hamiltoniano por parte de las transiciones del electrón entre celdas contiguas (inter-cell) las denotaremos como H^{inter} . De este modo puede escribirse el Hamiltoniano total de la ec. 2.3 como la suma de sus respectivas contribuciones

$$H = \gamma (H_{l2r}^{\text{intra}} + H_{r2l}^{\text{intra}}) + \lambda (H_{l2r}^{\text{inter}} + H_{r2l}^{\text{inter}}). \quad (2.4)$$

Cabe resaltar que escribiendo el Hamiltoniano de esta manera (usando la segunda cuantización) obtendremos los resultados en función del espacio real, es decir, en función de las N celdas unitarias o en función de los $2N$ sitios de red. Mientras

$$T = \begin{pmatrix} \mathbf{a} & \mathbf{b} \\ T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{matrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{b} \end{matrix}$$

FIGURA 2.3: Forma genérica de una matriz de transición en el modelo SSH.

que al escribir el Hamiltoniano en el espacio del momento obtendremos los mismos resultados, pero en función del vector de onda \mathbf{k} .

2.2. Implementación del Hamiltoniano

Para poder implementar la ec. 2.4 explicaremos como construir las matrices H^{inter} y H^{intra} , con el fin de obtener la matriz del Hamiltoniano total, esta matriz será de orden $2N \times 2N$ dado que existen $2N$ sitios en la red cristalina, es decir, el sistema posee $2N$ grados de libertad.

Primero definiremos la matriz de transición T_{ab} que representa una transición desde un átomo a hacia un átomo b y como se observa en la fig. 2.2 dicha transición puede ocurrir de izquierda a derecha (intra-cell) o de derecha a izquierda (inter-cell). De manera análoga definimos la matriz de transición T_{ba} desde un átomo b hacia un átomo a . Dado que el modelo SSH presenta solo dos sitios de red por cada celda unitaria, entonces nuestras matrices de transición serán del orden 2×2

$$T_{ab} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

$$T_{ba} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.6)$$

Para entender porque dichas matrices solo tienen una entrada igual a la unidad y el resto cero, debemos notar que la primera fila está relacionada al átomo a mientras la segunda fila está relacionada al átomo b y de igual manera con las columnas, como se observa en la fig. 2.3.

Para ser explícitos siempre tomamos el punto de partida en la fila y el punto de llegada en la columna. Por lo tanto si deseamos representar una transición desde el átomo a hacia el átomo b , la única entrada que debería ser distinta de cero sería la de la primera fila y segunda columna, tal como se aprecia en la ec. 2.5.

Mediante el mismo razonamiento necesitamos construir la matriz de las conexiones (o hoppings) entre una misma celda unitaria (intra-cell) y la matriz de los hoppings entre celdas unitarias adyacentes (inter-cell). La matriz de los hoppings internos h_{intra} será igual a una matriz identidad de orden $N \times N$ debido a las N celdas unitarias, de manera análoga la primera fila y la primera columna representarán a la primera celda unitaria y así sucesivamente. Dado que una matriz identidad tiene la unidad en la diagonal principal, esto quiere decir que la fila 1 se enlaza con la columna 1, la fila 2 con la columna 2 y así sucesivamente, lo cual representa justamente las conexiones dentro de una misma celda unitaria.

Siguiendo la misma lógica podemos construir la matriz de los hoppings entre celdas unitarias contiguas h_{inter} , la cual también será una matriz del orden $N \times N$ pero con las entradas distintas de cero solo en la diagonal superior, debido a que consideramos la fila como el punto de inicio y la columna como el punto final. La diagonal superior significa que la fila 1 se enlaza con la columna 2, la fila 2 con la columna 3 y así sucesivamente, lo cual representa las conexiones entre las celdas contiguas. En este caso, hemos considerado fronteras abiertas, a las cuales nos referiremos como OBC (open boundary conditions), pero en algunos cálculos utilizaremos fronteras cerradas, a las cuales nos referiremos como PBC (periodic boundary conditions). Para aplicar PBC al sistema simplemente deberemos enlazar la última celda unitaria con la primera, esto se implementa intercambiando un 0 por un 1 en el elemento de la matriz de la última fila y la primera columna.

De este modo podemos escribir las contribuciones al Hamiltoniano de la ec. 2.4 como la combinación de las matrices de transición con las matrices de los hoppings. Dicha combinación se la implementa por medio del producto tensorial, denotado por \otimes , donde $A \otimes B$ significa que cada elemento de la matriz A es multiplicado por la matriz B, es decir, estamos realizando un producto de Kronecker entre dichas matrices. Finalmente podemos escribir dichas contribuciones del Hamiltoniano como

$$H_{l2r}^{intra} = h_{intra} \otimes T_{ab} \quad (2.7)$$

$$H_{l2r}^{inter} = h_{inter} \otimes T_{ba}, \quad (2.8)$$

además como lo mencionamos en la ec. 2.3, los términos de derecha a izquierda (r2l) serán el complejo transpuesto de los términos de izquierda a derecha (l2r)

$$H_{r2l}^{intra} = (H_{l2r}^{intra})^\dagger \quad (2.9)$$

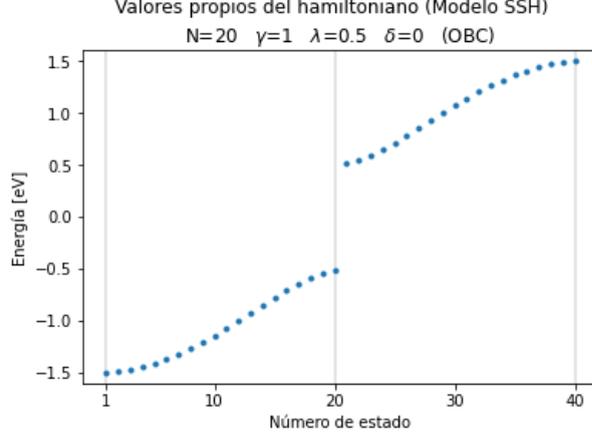


FIGURA 2.4: Valores propios del Hamiltoniano en la fase trivial.

$$H_{r2l}^{\text{inter}} = (H_{l2r}^{\text{intra}})^{\dagger}. \quad (2.10)$$

De este modo, por medio de la ec. 2.4 del Hamiltoniano del sistema, ya poseemos todas las herramientas matemáticas necesarias para implementar el modelo SSH. En nuestro trabajo de titulación utilizaremos el lenguaje de Python, haciendo uso de la librería de NumPy que nos facilita los cálculos con vectores y matrices.

2.3. Valores propios del Hamiltoniano

Ahora que ya tenemos implementado el Hamiltoniano del modelo SSH (ec. 2.4) podemos diagonalizarlo para obtener sus valores y vectores propios.

Analizando los valores propios podemos notar que el modelo SSH presenta dos fases bien definidas, establecidas por la razón entre las amplitudes de sus hoppings γ y λ . Cuando $|\gamma| > |\lambda|$ observamos que el cristal presenta un *gap* energético entre los estados ocupados y los desocupados, además como lo esperábamos, debido a que el modelo presenta un electrón por celda unitaria, la mitad de los estados están ocupados y la otra mitad desocupados, tal como se observa en la fig. 2.4. Cuando las amplitudes de los hoppings obedecen a esta relación, diremos que el aislante se encuentra en la fase trivial. Además por el momento aplicaremos OBC, es decir, el cristal tendrá una dimensión finita y consideraremos inicialmente que los sitios de la red cristalina no poseen una energía intrínseca asociada, es decir, no utilizaremos un término de hopping *on-site* ($\delta = 0$), ya que el funcionamiento de este término lo explicaremos más adelante.

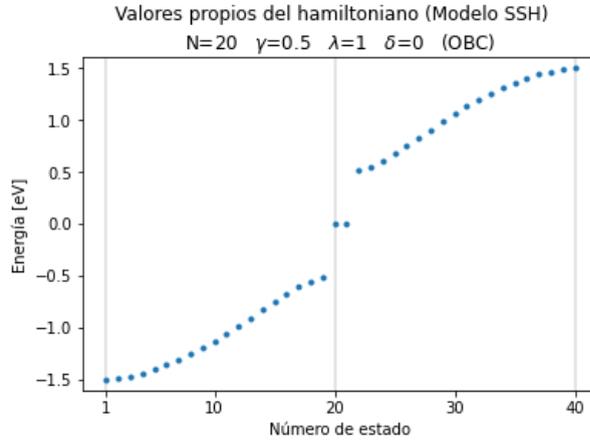


FIGURA 2.5: Valores propios del Hamiltoniano en la fase topológica (sin término *on-site* δ). Donde los estados con energía igual a cero son degenerados.

Por contraste cuando $|\gamma| < |\lambda|$ estaremos en la fase no trivial o fase topológica, este nombre se debe a que, en esta fase el cristal presenta propiedades robustas (inmunes a defectos en la red cristalina) que veremos más adelante, protegidas por las simetrías del sistema (la simetría de inversión y la simetría quiral en este caso). En el presente trabajo de titulación no ahondaremos en los aspectos topológicos de los modelos, debido a que esto sale del alcance del proyecto, pero mencionaremos los resultados más relevantes. Como se observa en la fig. 2.5, en la fase topológica el material también presenta un *gap* energético, pero en este caso tenemos en medio del *gap* dos estados degenerados con energía igual a cero, como veremos más adelante, estos estados corresponden a los dos átomos de los extremos del cristal, uno por cada lado.

Como acabamos de ver, en ambas fases el cristal se comporta como un aislante, sin embargo, el modelo también presenta un punto metálico cuando $|\gamma| = |\lambda|$, ya que como se observa en la fig. 2.6, las bandas se unen y el sistema ya no presenta un *gap* energético. Es decir, el modelo SSH presenta dos regímenes aislantes separados por un punto metálico.

Además si graficamos los valores propios del Hamiltoniano, es decir, las energías del sistema en función del hopping intra-cell (γ) con un hopping inter-cell fijo ($\lambda = 1$) podemos observar claramente la transición entre la fase trivial y la topológica en los puntos de transición $\gamma = -1$ y $\gamma = 1$, así como las energías en cero correspondientes a los estados degenerados de las fronteras, tal como se observa en la fig. 2.7.

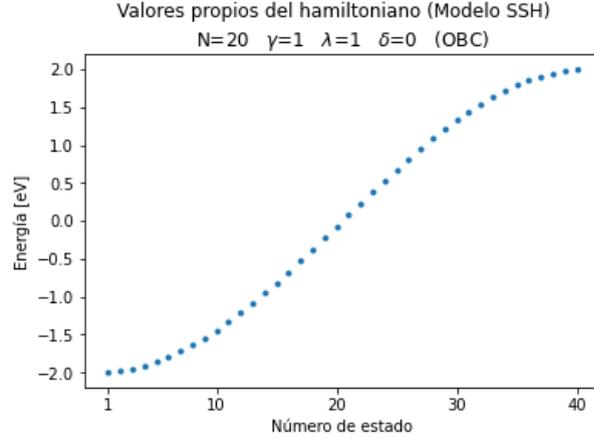


FIGURA 2.6: Valores propios del Hamiltoniano cuando $|\gamma| = |\lambda|$ correspondiente al punto metálico del modelo, donde se cierran las bandas (*gapless*).

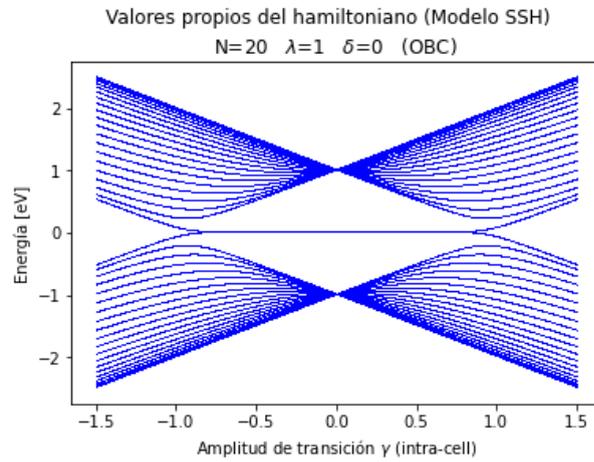


FIGURA 2.7: Espectro de energía en función de γ , con fase trivial en el intervalo: $-1.5 \leq \gamma < -1$ y $1 < \gamma \leq 1.5$, fase topológica en el intervalo: $-1 < \gamma < 1$ y energías en cero (línea horizontal) correspondientes a los estados degenerados de la frontera.

2.4. Vectores propios del Hamiltoniano

Para analizar los vectores propios del Hamiltoniano, primero debemos ordenarlos según su energía para poder separar los ocupados de los desocupados. Después procedemos a calcular la densidad de probabilidad de la función de onda (a la cual nos referiremos como PDF) de dichos estados, es decir, obtenemos su valor absoluto y lo elevamos al cuadrado, con el fin de observar cuales estados se encuentran completamente localizados.

De esta manera podemos graficar las PDFs de dos estados cualquiera de la fig. 2.5, verificando que dichos estados no se encuentran localizados, tal como se

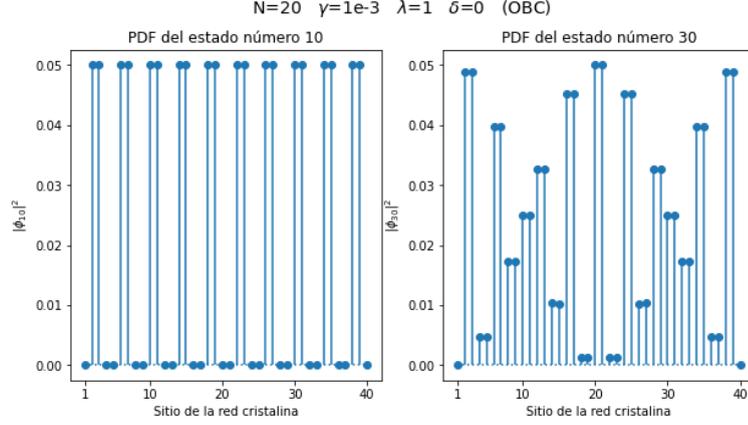


FIGURA 2.8: PDFs del estado número 10 y 30 en la fase topológica (Estados deslocalizados).

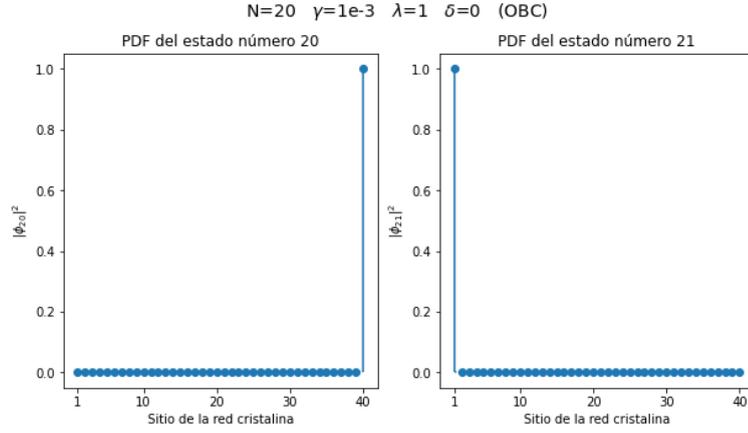


FIGURA 2.9: PDFs de los estados degenerados de la fase topológica con valor de γ lejano al valor de λ (Estados localizados en los extremos del cristal, en los sitios 1 y 40, vease la fig. 2.2).

observa en la fig. 2.8. Al realizar este procedimiento para el resto de los estados del sistema, se obtiene que en la fase trivial todos los estados están deslocalizados y en la fase topológica los únicos estados localizados son los dos estados degenerados en medio del *gap*.

Si observamos la fig. 2.5 notamos que los estados degenerados corresponden al número 20 y 21. Por lo tanto si graficamos las PDFs de estos estados, tal como se muestra en la fig. 2.9 observamos que están localizados en el sitio de la red cristalina número 1 y 40, que corresponden justamente a los sitios de los extremos del cristal, tal como vimos en la fig. 2.2.

De esta manera comprobamos que los estados degenerados en la fase topológica corresponden a los sitios de las fronteras del cristal, además cabe señalar que cuando el valor de γ se acerca al valor de λ los estados comienzan a deslocalizarse,

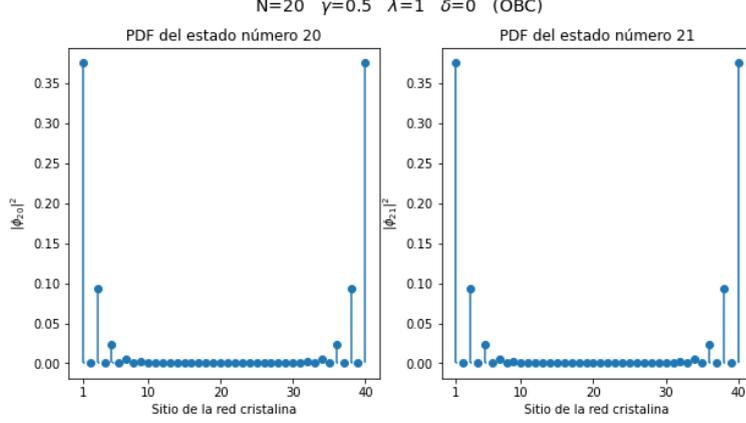


FIGURA 2.10: PDFs de los estados degenerados de la fase topológica con valor de γ cercano al valor de λ (Estados no completamente localizados en los extremos del cristal).

tal como se observa en la fig. 2.10, por tal motivo en el resto de este proyecto utilizaremos un valor de γ lejano al valor λ con la finalidad de obtener resultados más precisos y para poder apreciar mejor las propiedades emergentes en las fronteras del sistema.

2.5. Acumulación de carga en los extremos del cristal unidimensional

Como lo mencionamos anteriormente, el monopolo eléctrico lo calcularemos por medio de la ec. 1.36 obteniendo los vectores propios ψ^{elec} mediante la diagonalización del Hamiltoniano de la ec. 2.4. Es decir, la carga eléctrica del modelo se consigue sumando las PDFs de los estados ocupados del sistema. Considerando que el modelo SSH posee un electrón por cada celda unitaria y dado que el cristal posee N celdas unitarias, entonces éste también será el número de los estados ocupados $N_{\text{occ}} = N$.

Cabe mencionar que estamos calculando la carga eléctrica total del cristal, donde la parte entera se anulará con la carga de los iones (núcleos atómicos), por lo tanto, lo que nos interesa es la parte fraccionaria, ya que ésta es la carga producida por el dipolo eléctrico.

Sin embargo al realizar este cálculo nos encontramos con el problema de los estados degenerados, dado que dichos estados se encuentran justamente en el sitio de red número N y $N+1$ (fig. 2.5), al realizar la suma de las PDFs hasta el último

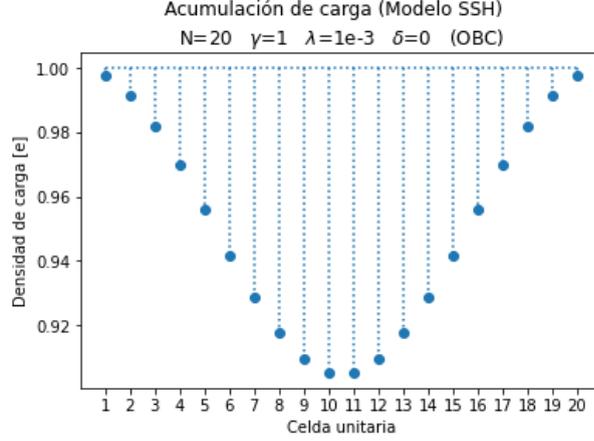


FIGURA 2.11: Monopolo eléctrico del modelo SSH en la fase trivial (sin término *on-site* δ).

estado ocupado $N_{\text{occ}} = N$ estaremos contando uno de los estados degenerados, pero al hacer esto corremos el riesgo de que la computadora en vez de elegir el primer estado degenerado como ψ_1 y el segundo como ψ_2 , elija para cada uno de estos estados una superposición de ambos y por lo tanto no estaremos seguros de la precisión de los resultados si consideramos los estados degenerados en nuestros cálculos. Por este motivo, por el momento realizaremos el cálculo de la carga eléctrica por medio de la ec. 1.36 pero solo sumando hasta $N_{\text{occ}} - 1$ es decir hasta $N - 1$, de esta manera no estaremos tomando en cuenta el primer estado degenerado en la posición N .

Realizando este procedimiento para la fase trivial observamos que no se produce acumulación de carga en los extremos del cristal, tal como se muestra en la fig. 2.11. Mientras que en la fase topológica el cristal sí presenta acumulación de carga en sus extremos, tal como se observa en la fig. 2.12. Cabe mencionar que estas imágenes nos dan una idea del comportamiento electrónico del material, pero dichos resultados no son completamente correctos ya que no estamos sumando hasta el último estado ocupado N_{occ} .

Para poder sumar hasta el estado $N_{\text{occ}} = N$ deberemos eliminar la degeneración de los estados N y $N + 1$. Dicha degeneración está protegida por la simetría de inversión del sistema. El modelo SSH presenta simetría de inversión ya que si invertimos la cadena con respecto a su centro obtendremos la misma red cristalina, debido a que no existe ninguna diferencia entre el átomo a y el átomo b . Esta simetría de inversión se rompe al introducir un término de energía *on-site* δ en el Hamiltoniano, el cual representa la energía intrínseca asociada a los sitios de la red cristalina. Por ejemplo si establecemos que el primer átomo tendrá una

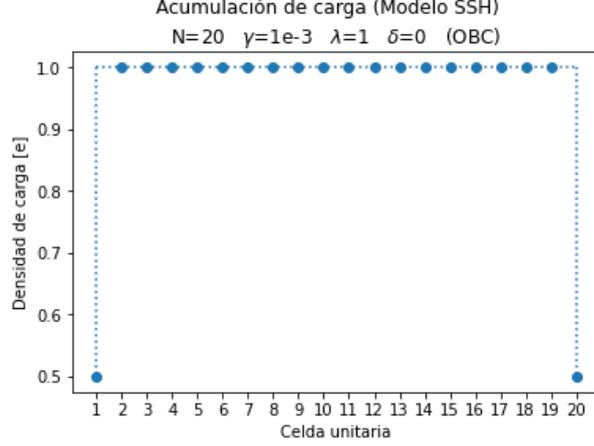


FIGURA 2.12: Monopolo eléctrico en la fase topológica (sin término *on-site* δ).

energía asociada de δ y el segundo una energía de $-\delta$, al invertir la cadena ya no obtendremos la misma red cristalina, tal como se observa en la fig. 2.13, es decir, se ha roto la simetría de inversión.

Además, el término *on-site* también se encarga de romper la simetría quiral del sistema. La simetría quiral se produce debido a que el modelo presenta *sublattice symmetry*, es decir, puedo dividir la celda unitaria en la mitad: una mitad para el átomo *a* y la otra para el átomo *b*, donde la *sublattice* de *a* solo está acoplada con la *sublattice* de *b* y viceversa, pero la de *a* no está acoplada con otra de *a*, ni la de *b* con otra de *b*. Además para presentar *sublattice symmetry* el átomo *a* debe tener la misma energía *on-site* del átomo *b* y dado que el modelo SSH inicialmente posee energía *on-site* igual a cero, podemos concluir que presenta simetría quiral. Cabe mencionar que si un sistema posee simetría quiral tendrá un espectro de energía simétrico, tal como vimos en la fig. 2.7, donde el espectro es completamente simétrico respecto a la energía cero. Por lo tanto, concluimos que el término *on-site* es el que se encarga de romper las dos simetrías del sistema (de inversión y la quiral), las cuales protegen la cuantización de la carga y de la polarización.

Para introducir este término *on-site* simplemente deberemos añadir al Hamiltoniano la contribución debida a esta energía *on-site* que la llamaremos H^{onsite} y se podrá escribir como la combinación de las conexiones entre una misma celda unitaria (h_{intra}) y las transiciones entre un mismo sitio de la red cristalina (T_{onsite}), es decir, podemos escribirlo como el producto Kronecker $H^{\text{onsite}} = h_{\text{intra}} \otimes T_{\text{onsite}}$, donde T_{onsite} esta dado por

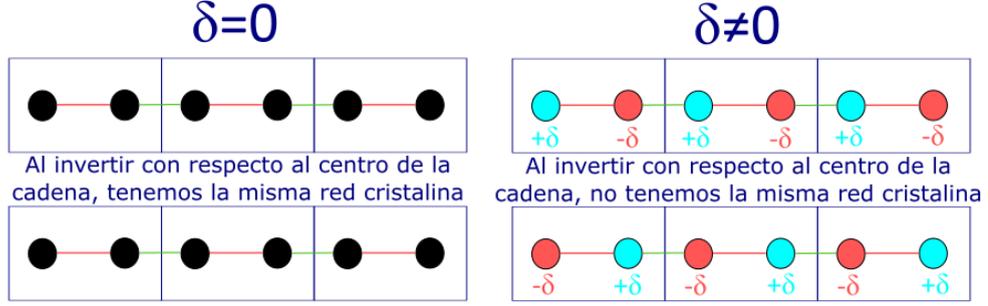


FIGURA 2.13: Red cristalina del modelo SSH con simetría de inversión cuando $\delta = 0$ (izquierda) y sin simetría de inversión cuando $\delta \neq 0$ (derecha).

$$T_{\text{onsite}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

ya que de este modo establecemos una energía *on-site* δ asociada al primer átomo y una energía *on-site* $-\delta$ para el segundo. Por lo tanto añadiendo este término a la ec. 2.12 podemos escribir el Hamiltoniano total del modelo SSH sin degeneraciones como

$$H = \gamma(H_{12r}^{\text{intra}} + H_{r2l}^{\text{intra}}) + \lambda(H_{12r}^{\text{inter}} + H_{r2l}^{\text{inter}}) + \delta(H^{\text{onsite}}). \quad (2.12)$$

Cabe señalar que con la finalidad de que el término *on-site* no interrumpa la cuantización de la carga y de la polarización, el valor de δ deberá ser pequeño (no mayor a 0.001eV). Por lo tanto diagonalizando este nuevo Hamiltoniano y obteniendo sus valores propios en la fase topológica, podemos observar que los estados con energía cero ahora se separan un poco entre sí, tal como se observa en la fig. 2.14.

Por lo tanto ahora ya podemos utilizar la ec. 1.36 para calcular la carga eléctrica en el sistema, sumando las PDFs de todos los estados ocupados, es decir hasta el estado $N_{\text{occ}} = N$. Al realizar este procedimiento se observa claramente que en la fase trivial el cristal no presenta ningún tipo de excedente o déficit de carga, es decir, en la fase trivial no existe una acumulación de carga en los extremos del cristal, tal como se observa en la fig. 2.15.

Mientras que en la fase topológica sí se observa un déficit de carga en el extremo izquierdo del cristal y un excedente carga en el extremo derecho del cristal, tal como se observa en la fig. 2.16.

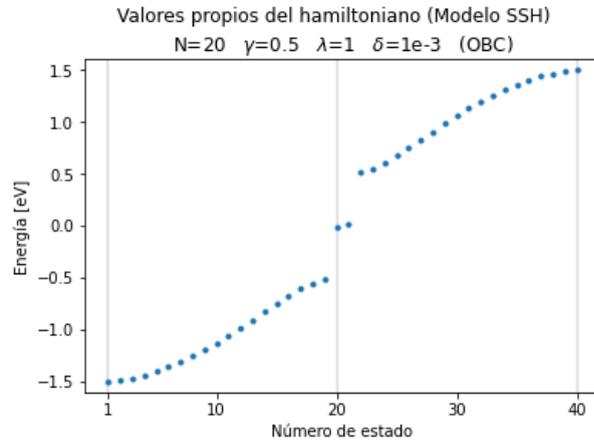


FIGURA 2.14: Valores propios del Hamiltoniano en la fase topológica (con término *on-site* δ). Donde los estados cercanos a energía cero ya no son degenerados.

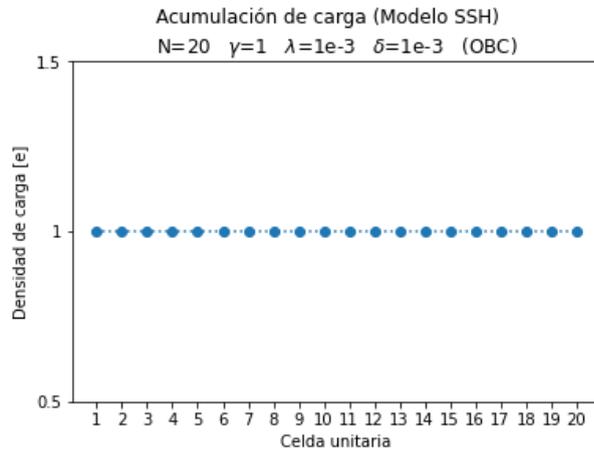


FIGURA 2.15: Monopolio eléctrico en la fase trivial (con término *on-site* δ).

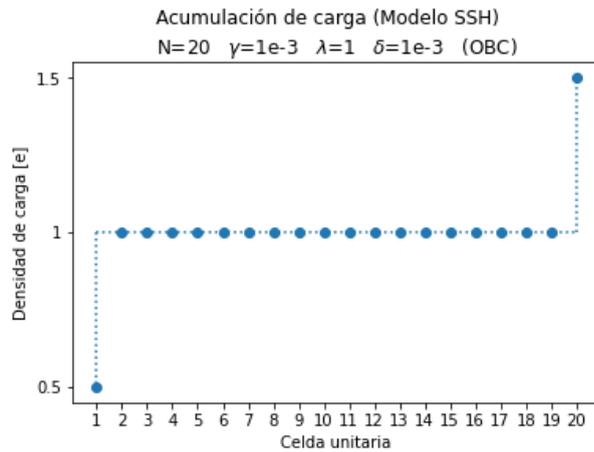


FIGURA 2.16: Monopolio eléctrico en la fase topológica (con término *on-site* δ).

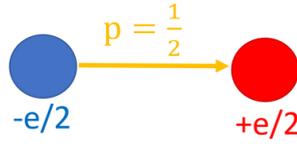


FIGURA 2.17: Dipolo eléctrico formado en el modelo SSH.

2.6. Polarización eléctrica y centros de Wannier

Como vimos en la fig. 2.16, en la fase topológica el aislante cristalino del modelo SSH presenta al lado izquierdo un déficit de carga ($-0.5e$) y en el lado derecho un excedente de carga ($+0.5e$), formando así un dipolo eléctrico de $1/2$, como se aprecia en la fig. 2.17. Dado que el modelo presenta acumulación de carga en los extremos del cristal de la misma magnitud pero con signo opuesto, podemos calcular este dipolo eléctrico por medio de la ec. 1.18, es decir, por la suma de las cargas por sus posiciones: $p = q^- d^- + q^+ d^+ = \frac{-e}{2} \frac{-1}{2} + \frac{e}{2} \frac{1}{2} = \frac{1}{2}e$. Por lo tanto concluimos que el modelo SSH presenta un dipolo eléctrico de $1/2$ en la fase topológica y de 0 en la fase trivial, ya que como se observa en la fig. 2.15, no existe déficits ni excedentes de carga en la fase trivial, y como lo mencionamos anteriormente las partes enteras de la carga eléctrica se anularán con las cargas de los iones del material.

2.6.1. Cuantización de la polarización (polarization quantum)

Existe cierta indeterminación al definir la polarización (dipolo por unidad de volumen) en un sólido cristalino, ya que debido a la periodicidad de la red cristalina se obtiene una polarización multivaluada. Para ilustrar mejor este concepto utilizaremos el ejemplo mencionado en la ref. [11], imaginemos que tenemos una red cristalina unidimensional formada por aniones ($-e$) y cationes ($+e$) alternados con distancia anión-catión de d . A continuación procedemos a introducir el dipolo anión-catión centrado dentro de una celda unitaria tridimensional de volumen $V = a^3$ y luego introducimos el dipolo catión-anión centrado dentro de la misma celda unitaria, como se observa en la fig. 2.18.

Al calcular la polarización para la primera celda unitaria necesitaremos primero calcular el dipolo eléctrico $p = q^- d^- + q^+ d^+ = -e \frac{-1}{2} + e \frac{1}{2} = ed$, de modo que la polarización (dipolo por unidad de volumen $P = \frac{p}{V}$) estará dada por $P = \frac{ed}{V}$.

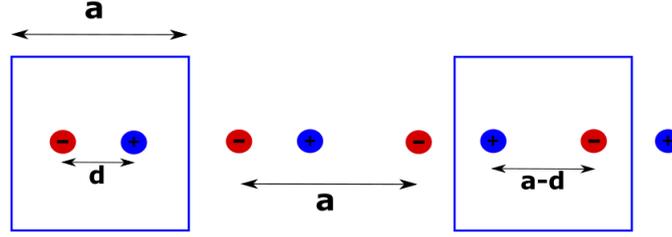


FIGURA 2.18: Vista frontal de una red cristalina unidimensional formada por aniones y cationes alternados, con dos distintas celdas unitarias tridimensionales. La primera celda unitaria contiene un dipolo anión-catión y la segunda contiene un dipolo catión-anión. Siendo a la constante de la red cristalina y d la distancia anión-catión.

Mientras que si calculamos el dipolo en la segunda celda unitaria obtenemos $p = q^+d^+ + q^-d^- = +e\frac{a-d}{2} - e\frac{a-d}{2} = ed - ea$, de modo que la polarización estará dada por $P = \frac{ed}{V} - \frac{ea}{V}$. Como podemos observar el valor de la polarización depende de la celda unitaria, por lo tanto si elegimos todas las celdas unitarias posibles, podremos escribir de manera general la polarización como $P = \frac{ed}{V} + n\frac{ea}{V}$, siendo n cualquier entero y dado que a representa el vector de red \mathbf{R} en uno de los ejes, podemos generalizar a $\mathbf{P} = \frac{e\mathbf{d}}{V} + n\frac{e\mathbf{R}}{V}$, donde este segundo término es proporcional al llamado cuanto de polarización $\mathbf{P}_q = \frac{e\mathbf{R}}{V}$ y por lo tanto concluimos que la polarización en un sólido cristalino periódico solo puede ser definida modulo el cuanto de polarización \mathbf{P}_q . Esto se debe a que si movemos una carga electrónica una distancia proporcional al vector de red \mathbf{R} , esto no altera el sistema físico, debido a la periodicidad del cristal, pero sí cambia la polarización en una cantidad proporcional a $\frac{e\mathbf{R}}{V}$.

Dado que en el presente proyecto solo trabajaremos con polarizaciones que posan sobre un solo eje, necesitaremos reducir este problema a una sola dimensión. En este caso tendremos $V = a$ y $R = a$ de modo que el cuanto de polarización se reduce a $P_q = e$, por lo tanto, podemos concluir que para los modelos en los que trabajaremos en este proyecto la polarización eléctrica siempre estará definida modulo e . Además cabe señalar que si normalizamos el volumen de la celda unitaria a la unidad, podemos referirnos al dipolo y a la polarización como la misma magnitud. De esta manera concluimos que en los modelos que estudiaremos en este proyecto, lo que nos interesa calcular es solo la parte fraccionaria tanto del monopolo como del dipolo eléctrico.

2.6.2. Centros de Wannier

Como lo mencionamos anteriormente, los centros de Wannier se calculan obteniendo el valor esperado del operador posición, por lo tanto representan las posiciones de los electrones y serán calculados por medio de la ec. 1.44. En esta ecuación Resta codificó las posiciones de los electrones dentro de las fases de un nuevo operador posición, por este motivo a los centros de Wannier también los llamaremos fases. Como veremos más adelante, es importante que nuestro operador posición sea compatible con PBC, ya que al cerrar las fronteras los centros de Wannier se ubican en las posiciones correctas, mientras que al abrirlas los centros de Wannier se distorsionan.

2.6.2.1. Valor esperado del operador posición

Básicamente para conocer las posiciones electrónicas necesitamos calcular el valor esperado del operador posición $\langle U_x \rangle$, sin embargo no cualquier operador posición U_x funciona con PBC, por lo tanto utilizaremos la ecuación de Resta, pero con una pequeña modificación. Ya que la ec. 1.44 presenta el operador posición en función de la longitud de la red cristalina L : $U_x \sim e^{i\frac{2\pi}{L}\hat{X}}$, pero en nuestro proyecto escribiremos el operador posición en función del número de celdas unitarias N : $U_x \sim e^{i\frac{2\pi}{N}\hat{R}}$ denotando a R como el contador de celdas unitarias ($R = 1, 2, \dots, N$). Es decir, no mediremos las posiciones electrónicas en función de la longitud de la red cristalina L , sino en función del número de celdas unitarias N , lo cual es completamente equivalente.

Para simplificar la explicación del cálculo del valor esperado del operador posición $\langle U_x \rangle$, imaginemos que nuestra red cristalina solamente posee 4 celdas unitarias ($N = 4$), las cuales formarán un círculo al momento de aplicar PBC, tal como se muestra en la fig. 2.19.

Primero deberemos construir el operador posición de los electrones para luego obtener su valor esperado y dado a que el operador posición debe tener en sus fases la información de las posiciones electrónicas lo podemos definir como

$$U_x = \sum_{R=1}^N \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{orb}}} |R, \alpha\rangle e^{i\frac{2\pi}{N}R} \langle R, \alpha| \quad (2.13)$$

donde α es el contador de los orbitales por celda unitaria $\alpha = 1, \dots, N_{\text{orb}}$, siendo N_{orb} el número de orbitales por celda unitaria, es decir, el número de sitios por

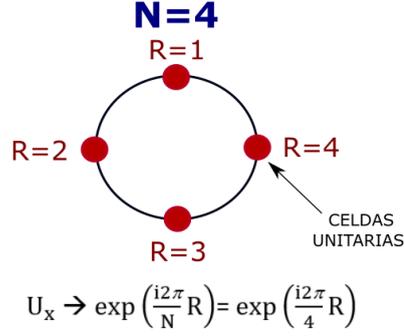


FIGURA 2.19: Esquema de las celdas unitarias (puntos rojos) en red cristalina con PBC. Siendo N el número de celdas unitarias ($N = 4$), R el contador de las celdas unitarias ($R = 1, 2, 3, 4$) y U_x el operador posición proporcional a $e^{i\frac{2\pi}{N}\hat{R}}$.

cada celda unitaria. Dado que el modelo SSH presenta dos sitios por celda, tenemos $N_{\text{orb}} = 2$.

Si analizamos la ec. 2.13 notaremos que el operador posición U_x corresponde a una matriz diagonal de orden $2N \times 2N$, dado que tenemos N celdas unitarias ($R = 1, \dots, N$) y dos sitios por cada celda unitaria ($\alpha = 1, 2$). Notemos también que el *ket* $|R, \alpha\rangle$ corresponde a una matriz columna de orden $2N \times 1$, mientras que el *bra* $\langle R, \alpha|$ corresponde a una matriz fila de orden $1 \times 2N$, debido a la multiplicación de estas matrices obtenemos el orden final de $2N \times 2N$ que corresponde a la matriz U_x . Por lo tanto, el operador posición U_x será una matriz diagonal de orden igual al número de sitios totales de la red cristalina o grados de libertad del sistema. Siendo los dos primeros términos de la diagonal iguales a $e^{i\frac{2\pi}{N}1}$, los siguientes dos términos iguales a $e^{i\frac{2\pi}{N}2}$ y así sucesivamente, dado que los dos primeros sitios pertenecen a la primera celda unitaria, los siguientes dos a la segunda y así sucesivamente.

Ahora para calcular el valor esperado de U_x deberemos considerar que estamos trabajando con un aislante cristalino, donde los únicos estados que intervienen son los estados ocupados o estados llenos del sistema, ya que los electrones solo están presentes hasta el nivel de Fermi. Para lo cual haremos uso del operador proyector de las bandas ocupadas P_{occ} , el cual realiza una proyección en el subespacio de Hilbert de los estados ocupados y está definido como

$$P_{\text{occ}} = \sum_{n=1}^{N_{\text{occ}}} |\psi_n^{\text{elec}}\rangle \langle \psi_n^{\text{elec}}| \quad (2.14)$$

donde como ya lo mencionamos anteriormente, n es el contador de los estados ocupados, N_{occ} es el número de estados ocupados y ψ^{elec} son los vectores propios del Hamiltoniano del sistema. Como podemos notar el operador P_{occ} también

corresponde a una matriz de orden $2N \times 2N$, debido a que cada vector propio del Hamiltoniano tendrá $2N$ entradas correspondientes a los $2N$ sitios de la red cristalina. Además cabe mencionar que el operador proyector se caracteriza por ser una matriz idempotente ($P_{\text{occ}}^2 = P_{\text{occ}}$) y porque su traza es igual al número de electrones del sistema.

Por medio del operador proyector de estados ocupados P_{occ} , procedemos a calcular el valor esperado del operador posición como

$$\langle U_x \rangle = \langle P_{\text{occ}} | U_x | P_{\text{occ}} \rangle. \quad (2.15)$$

Finalmente para calcular las posiciones electrónicas o centros de Wannier, debemos recordar que dichas posiciones estaban codificadas dentro de las fases del operador posición U_x . Por lo tanto, el procedimiento para obtener los centros de Wannier es diagonalizar la matriz $\langle U_x \rangle$ y obtener las fases de sus valores propios, entendiendo como fase al ángulo entre su parte real e imaginaria. También cabe mencionar que los valores propios de $\langle U_x \rangle$ tendrán la forma $\exp \left[i \frac{2\pi}{N} \bar{r} \right]$, por lo tanto para obtener los centros de Wannier \bar{r} deberemos calcular la fase de dicho valor propio y dividirla para 2π , esta división es importante para obtener los resultados correctos, tal como lo muestra Resta en la ec. 1.44.

Dado que la matriz $\langle U_x \rangle$ es de orden $2N \times 2N$ al diagonalizarla tendremos $2N$ valores propios, de los cuales la mitad tendrá magnitud igual a 0 y la otra mitad tendrá magnitud igual a 1, tal como se observa en la fig. 2.20. Por lo tanto las posiciones de los N electrones del sistema se obtendrán por medio de los valores propios con magnitud igual a la unidad. Además podemos comprobar que entre mayor número de celdas unitarias, más cercana a 1 será la magnitud de dichos valores propios, tal como se observa en la fig. 2.21.

Cabe mencionar que al obtener la fase de un número complejo, Python nos entrega la fase en el intervalo $[-\pi, \pi]$, de este modo al dividirla para 2π obtenemos un número en el intervalo $[-0.5, 0.5]$. Además dado que el operador posición está escrito en función de las celdas unitarias $U_x \sim e^{i \frac{2\pi}{N} R}$ es fácil notar que en el intervalo de $[-0.5, 0.5]$ los centros de cada celda unitaria estarán espaciados entre ellos una distancia $1/N$, por lo tanto para una mejor visualización graficaremos los centros de cada celda unitaria con líneas grises que nos servirán como líneas guía. Graficando los centros de Wannier con OBC, podemos observar que en fase trivial los electrones están pegados a los núcleos atómicos, ya que en este caso la función de onda del electrón está distribuida entre los dos iones, es decir, en la

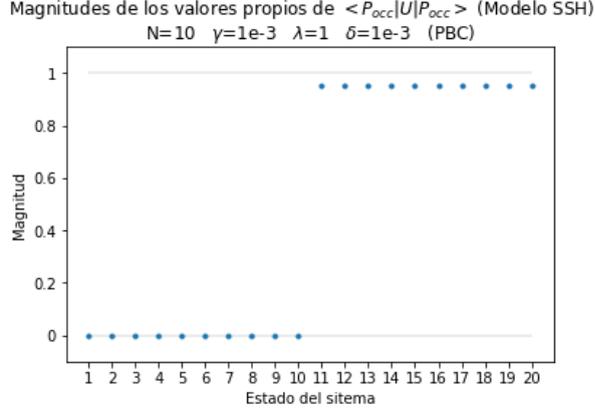


FIGURA 2.20: Magnitudes de los valores propios de $\langle U_x \rangle$ en la fase topológica con $N = 10$.

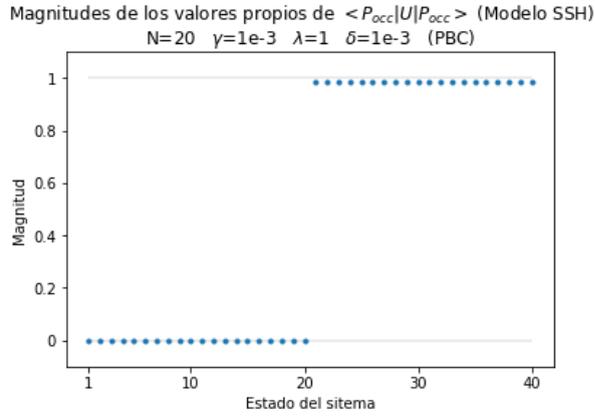


FIGURA 2.21: Magnitudes de los valores propios de $\langle U_x \rangle$ en la fase topológica con $N = 20$.

fase trivial los electrones se ubican justo en el centro de cada celda unitaria, tal como se observa en la fig. 2.22. Mientras que en la fase topológica casi todos los electrones están desplazados media celda unitaria, tal como se muestra en la fig. 2.23.

Además como lo mencionamos anteriormente, la importancia de que el operador U_x sea compatible con PBC se pone en manifiesto al graficar los centros de Wannier, ya que al utilizar OBC los centros se distorsionan, esto se observa en la fig. 2.23 donde el sexto centro de Wannier (punto rojo) no se encuentra desplazado media celda unitaria como el resto. Esto se soluciona aplicando PBC, tal como se observa en la fig. 2.24, por este motivo es importante calcular los centros de Wannier con fronteras cerradas.

Por lo tanto al graficar los centros de Wannier podemos concluir que en la fase topológica los electrones se encuentran desplazados media celda unitaria respecto

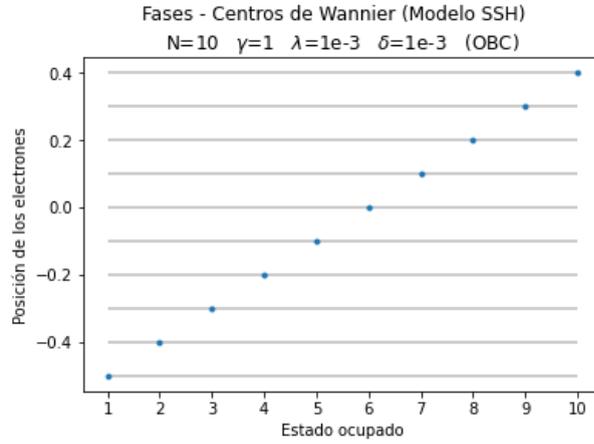


FIGURA 2.22: Centros de Wannier en fase trivial con OBC, ubicados justo en el centro de cada celda unitaria. Líneas grises representan los centros de cada celda unitaria.

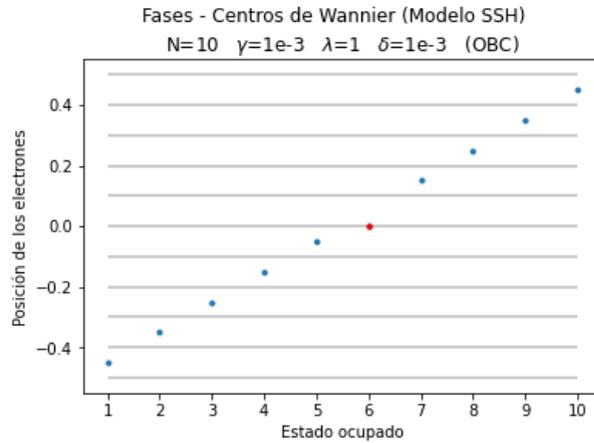


FIGURA 2.23: Centros de Wannier en fase topológica con OBC, casi todos desplazados media celda unitaria, con excepción del sexto centro de Wannier (punto rojo). Líneas grises representan los centros de cada celda unitaria.

a los núcleos atómicos formando así un dipolo de $1/2$, mientras que en la fase trivial los electrones se mantienen junto a los núcleos atómicos sin producir dipolo alguno, tal como se observa en la fig. 2.25. Recordemos que esto es consistente con los resultados de la carga eléctrica, donde en la fase topológica existe una acumulación de carga con signos opuestos en los extremos del cristal, mientras que en la fase trivial dicha acumulación de carga desaparece.

Para observar mejor la transición de los centros de Wannier entre la fase trivial y la topológica podemos graficar dichos centros en función del hopping intra-cell (γ) con un hopping inter-cell fijo ($\lambda = 1$) como lo hicimos anteriormente para las energías, tal como se observa en la fig. 2.26.

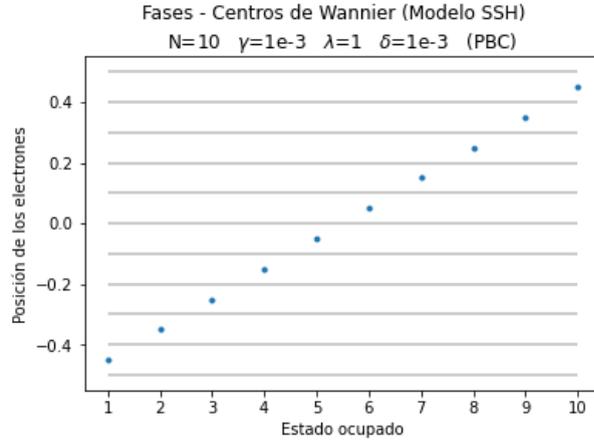


FIGURA 2.24: Centros de Wannier en fase topológica con OBC, todos desplazados media celda unitaria. Líneas grises representan los centros de cada celda unitaria.

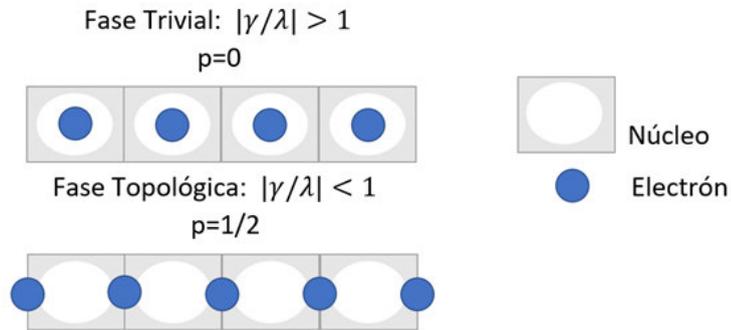


FIGURA 2.25: Electrones junto a sus núcleos en la fase trivial sin producir dipolo ($p = 0$) y electrones desplazados media celda unitaria formando dipolo ($p = 1/2$) en la fase topológica.

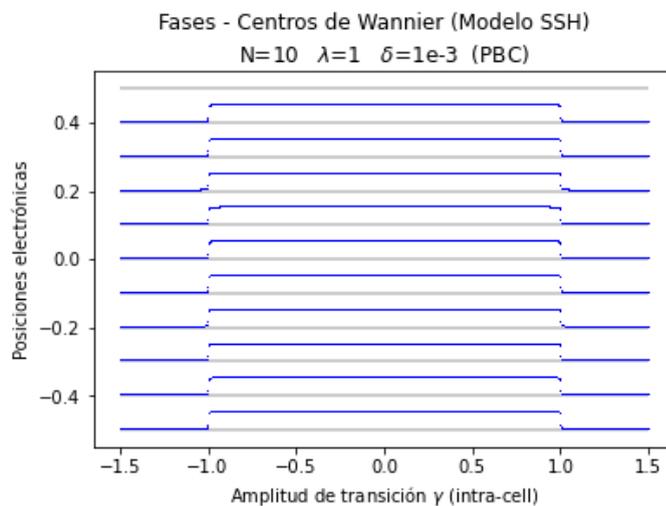


FIGURA 2.26: Centros de Wannier en función de γ con fase trivial en el intervalo: $-1.5 \leq \gamma < -1$ y $1 < \gamma \leq 1.5$, fase topológica en el intervalo: $-1 < \gamma < 1$. Líneas grises representan los centros de cada celda unitaria.

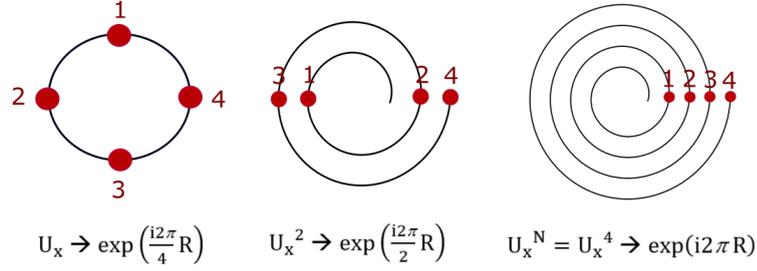


FIGURA 2.27: Esquema de las celdas unitarias con matriz $\langle U_x \rangle$ sin elevar (izquierda), con matriz $\langle U_x \rangle$ elevada al cuadrado (medio) y con matriz $\langle U_x \rangle$ elevada a N (derecha). De modo que al elevar a la N -ésima potencia las celdas unitarias queden completamente alineadas.

Como veremos más adelante, en ocasiones es más útil graficar los centros de Wannier respecto a una sola celda unitaria. Esto se realiza elevando la matriz $\langle U_x \rangle$ a la N -enésima potencia antes de obtener sus valores propios. Para explicar este procedimiento de manera esquemática, imaginemos que nuestra red cristalina solo posee cuatro celdas unitarias ($N = 4$), en este caso como lo mencionamos anteriormente en la fig. 2.19 el operador posición será $U_x \sim e^{i\frac{2\pi}{N}R} = e^{i\frac{\pi}{2}R}$, es decir, la distancia entre cada celda unitaria será $\pi/2$. Ahora si elevamos al cuadrado el operador posición será $U_x^2 \sim e^{i\frac{4\pi}{N}R} = e^{i\pi R}$, es decir, cada celda unitaria estará separada por una distancia π , mientras que si elevamos el operador posición a la N (número de celdas unitarias) tendremos $U_x^4 \sim e^{i\frac{8\pi}{N}R} = e^{i2\pi R}$, en este caso cada celda unitaria estará separada 2π de la siguiente, es decir una vuelta completa, quedando de esta manera todas las celdas unitarias alineadas entre sí. Es por este motivo que al elevar la matriz $\langle U_x \rangle$ al a N -ésima potencia estamos enrollado el círculo N veces de modo que ahora no mapea toda la red cristalina, sino solo una celda unitaria, tal como se muestra en la fig. 2.27.

Al obtener las fases de los valores propios de la matriz $\langle U_x \rangle^N$ podemos volver a graficar los centros de Wannier en función del hopping intra-cell (γ) con un hopping inter-cell fijo ($\lambda = 1$) y notaremos que simplemente hemos hecho un acercamiento o “zoom” a la fig. 2.26, por este motivo nos referiremos a este procedimiento como ZOOM, obteniendo así la transición entre fases que sufre el electrón en una sola celda unitaria, tal como se observa en la fig. 2.28.

Graficando los centros de Wannier respecto a una sola celda unitaria se puede entender mejor el sentido físico del intervalo $[-0.5, 0.5]$, ya que un centro de Wannier en -0.5 significará que el electrón esta desplazado media celda unitaria hacia la izquierda, mientras que un centro de Wannier en 0.5 representará un desplazamiento de media celda unitaria hacia la derecha.

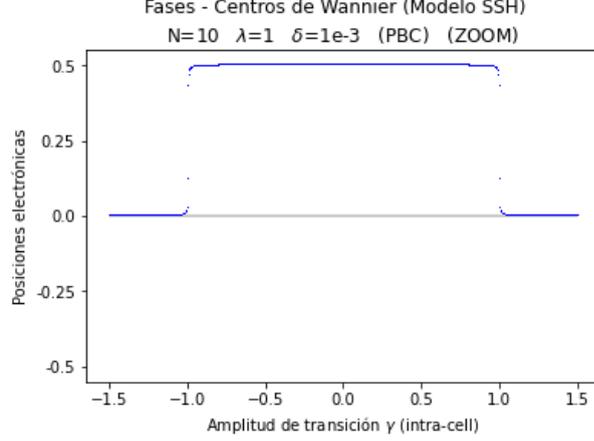


FIGURA 2.28: Centros de Wannier de una sola celda unitaria (calculados por medio del procedimiento del ZOOM) con fase trivial en el intervalo: $-1.5 \leq \gamma < -1$ y $1 < \gamma \leq 1.5$ y fase topológica en el intervalo: $-1 < \gamma < 1$. Línea gris representa el centro de la celda unitaria.

2.6.3. Polarización eléctrica

Como lo mencionamos anteriormente, la polarización eléctrica está dada por la suma de los dipolos eléctricos formados en cada celda unitaria, por lo tanto, la polarización puede ser escrita como la suma de los centros Wannier, obtenidos por medio de la diagonalización de la matriz $\langle U_x \rangle$ dada por la ec. 2.15 o de manera equivalente también podemos calcular la polarización eléctrica tal como la definió Resta en la ec. Ecuación 1.46, obteniendo así los siguientes resultados:

Fase trivial con N par

$$P_{\text{elec}} = 0.5 [e] \quad (2.16)$$

Fase topológica con N par

$$P_{\text{elec}} = 0 [e] \quad (2.17)$$

Fase trivial con N impar

$$P_{\text{elec}} = 0 [e] \quad (2.18)$$

Fase topológica con N impar

$$P_{\text{elec}} = 0.5 [e]. \quad (2.19)$$

Por lo tanto, vemos que los resultados presentan una inconsistencia ya que varían según la paridad del número de celdas unitarias. Además tal como lo verificamos al graficar los centros de Wannier en la fase trivial y en la topológica,

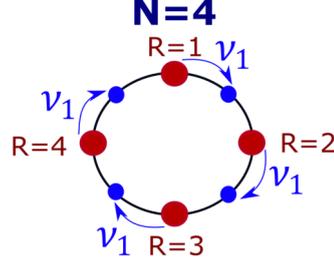


FIGURA 2.29: Esquema de los centros de las celdas unitarias (puntos rojos) en red cristalina con PBC. Siendo N el número de celdas unitarias ($N = 4$), R el contador de las celdas unitarias ($R = 1, 2, 3, 4$) y ν_1 el desplazamiento del electrón (puntos azules) respecto al centro de su respectiva celda unitaria.

mostrados en la fig. 2.22 y en la fig. 2.24, respectivamente, el valor de la polarización eléctrica debería ser 0 en la fase trivial y 0.5 la fase topológica, indistintamente de la paridad del número de celdas unitarias.

A continuación, intentaremos encontrar la razón de esta inconsistencia. Para lo cual comenzaremos estudiando la densidad de polarización p_x de Resta dada por la ec. 1.46, la cual de manera equivalente puede ser escrita como

$$p_x = \frac{1}{2\pi} \text{Im} \log \text{Det}(P_{\text{occ}} U_x P_{\text{occ}}). \quad (2.20)$$

Además recordemos que los valores propios de $P_{\text{occ}} U_x P_{\text{occ}}$ tienen la forma de $\exp\left[i\frac{2\pi}{N}\bar{r}\right]$ tal como se mencionó en la ec. 2.15, donde \bar{r} representa los centros de Wannier. Por lo tanto, el determinante de $P_{\text{occ}} U_x P_{\text{occ}}$ estará compuesto por la multiplicación de estos valores propios

$$p_x = \frac{1}{2\pi} \text{Im} \log \prod_{R=1}^N \prod_{j=1}^{N_o} \exp\left[i\frac{2\pi}{N}(\nu_j + R)\right], \quad (2.21)$$

donde el número de orbitales totales por celda unitaria N_{orb} puede ser descompuesto como la suma de los orbitales ocupados N_o y los desocupados N_u , es decir, $N_{\text{orb}} = N_o + N_u$. Además, en la ec. 2.21 podemos observar que se ha descompuesto los centros de Wannier $\bar{r} = \nu + R$, donde R representa el centro de la celda unitaria con respecto a la cual se ha desplazado el electrón una distancia ν . Dado que el modelo unidimensional SSH posee solo un electrón por celda unitaria, ν_1 representa el desplazamiento de ese único electrón, tal como se muestra en la fig. 2.29.

Ahora en la ec. 2.21 aplicaremos la propiedad del logaritmo de una multiplicación, con la finalidad de simplificar el logaritmo con la exponencial

$$p_x = \frac{1}{N} \sum_{R=1}^N \sum_{j=1}^{N_o} (\nu_j + R), \quad (2.22)$$

introduciendo ambas sumatorias en cada término y considerando $\sum_R 1 = N$ y $\sum_j 1 = N_o$ tenemos

$$p_x = \frac{1}{N} \left(N \sum_{j=1}^{N_o} \nu_j + N_o \sum_{R=1}^N R \right), \quad (2.23)$$

finalmente aplicando la relación $\sum_{i=1}^N i = \frac{N(N+1)}{2}$ obtenemos una expresión general para la densidad de polarización

$$p_x = \sum_{j=1}^{N_o} \nu_j + \frac{N_o(N+1)}{2}. \quad (2.24)$$

Ahora analizando esta última expresión para el modelo SSH que presenta solo un electrón por celda unitaria ($N_o = 1$) tenemos

$$p_x = \nu_1 + \frac{(N+1)}{2}, \quad (2.25)$$

donde el desplazamiento del electrón respecto a su celda unitaria ν_1 es igual a cero en la fase trivial y 0.5 en la fase topológica, tal como lo verificamos en la fig. 2.22 y en la fig. 2.24, respectivamente.

Finalmente debido a la periodicidad de 2π de las fases podemos utilizar la ec. 2.25 modulo 1 para calcular la densidad de polarización p_x , comprobando así que el segundo término de la ec. 2.24 es el que produce las inconsistencias relacionadas a la paridad del número de celdas unitarias.

Fase trivial con N par

$$p_x = 0 + \frac{N_{\text{par}} + 1}{2} = 0.5 \text{ mod } 1 \quad (2.26)$$

Fase topológica con N par

$$p_x = 0.5 + \frac{N_{\text{par}} + 1}{2} = 0 \text{ mod } 1 \quad (2.27)$$

Fase trivial con N impar

$$p_x = 0 + \frac{N_{\text{impar}} + 1}{2} = 0 \text{ mod } 1 \quad (2.28)$$

Fase topológica con N impar

$$p_x = 0.5 + \frac{N_{\text{impar}} + 1}{2} = 0.5 \text{ mod } 1. \quad (2.29)$$

Dado que la polarización eléctrica en aislantes cristalinos está dada por los dipolos formados en cada celda unitaria y estos están representados por los desplazamientos de los electrones respecto a los centros de su respectiva celda unitaria, entonces la expresión correcta para la densidad de polarización debería ser

$$p_x = \sum_{j=1}^{N_o} \nu_j, \quad (2.30)$$

por lo tanto, al comparar la ec. 2.30 con la ec. 2.24 llegamos a la conclusión que necesitamos redefinir la polarización eléctrica de Resta dada por la ec. 1.46 añadiendo un término corrector que elimine el segundo término de la ec. 2.24.

Ahora por facilidad vamos a definir a U como una matriz compuesta por los vectores propios del Hamiltoniano ubicados en forma de columna, es decir será del orden de $N_{\text{tot}} \times N_{\text{occ}}$, donde $N_{\text{tot}} = N_{\text{orb}} N$ es el número de sitios totales en la red cristalina y $N_{\text{occ}} = N_o N$ es el número de los sitios ocupados. De la misma manera definiremos U^\dagger como una matriz compuesta por el complejo conjugado de los vectores propios del Hamiltoniano ubicados en forma de fila, es decir será del orden $N_{\text{tot}} \times N_{\text{occ}}$. De esta manera podemos reescribir la ec. 2.14 del operador proyector como

$$P_{\text{occ}} = UU^\dagger, \quad (2.31)$$

y también podemos reescribir la ec. 2.15 del valor esperado del operador posición como

$$\langle U_x \rangle = P_{\text{occ}} U_x P_{\text{occ}} = UU^\dagger U_x UU^\dagger, \quad (2.32)$$

además, cabe recordar que tanto el operador proyector P_{occ} como el operador posición U_x están representados por una matriz de orden $N_{\text{tot}} \times N_{\text{tot}}$, por lo tanto, al diagonalizar $P_{\text{occ}} U_x P_{\text{occ}}$ obtendremos N_{tot} valores propios, pero cabe señalar que de todos estos valores propios solo N_{occ} tendrán magnitud distinta de cero. Es decir, en el caso del modelo SSH, al diagonalizar $P_{\text{occ}} U_x P_{\text{occ}}$ obtendremos $2N$ valores propios de los cuales solo N valores propios tendrán magnitud distinta de

cero. Por lo tanto, con la finalidad de evitar que el determinante de $P_{\text{occ}}U_xP_{\text{occ}}$ sea siempre cero, deberemos deshacernos de los valores propios nulos. Esto se soluciona al notar que la primera matriz U y la última matriz U^\dagger de la ec. 2.32 no son necesarias, ya que estas matrices son las producen los valores propios triviales. Por lo tanto, podemos reescribir la ec. 2.32 como

$$\langle U_x \rangle = U^\dagger U_x U, \quad (2.33)$$

de esta manera es fácil notar que la matriz $U^\dagger U_x U$ será del orden $N_{\text{occ}} \times N_{\text{occ}}$ y al diagonalizarla obtendremos solamente los N_{occ} valores propios con magnitud distinta de cero. Por lo tanto, podemos reescribir la ec. 2.20 como

$$p_x = \frac{1}{2\pi} \text{Im} \log \text{Det}(U^\dagger U_x U). \quad (2.34)$$

y debido a que la ec. 2.20 y la ec. 2.34 presentan los mismos valores propios no triviales, entonces al descomponer la ec. 2.34 obtendremos de nuevo la ec. 2.24, es decir

$$p_x = \frac{1}{2\pi} \text{Im} \log \text{Det}(U^\dagger U_x U) = \sum_{j=1}^{N_o} \nu_j + \frac{N_o(N+1)}{2}. \quad (2.35)$$

Por lo tanto ahora solo nos queda encontrar un término corrector que elimine el término $\frac{N_o(N+1)}{2}$ de la ec. 2.35. Para encontrar este término corrector analizaremos el determinante del operador posición U_x , el cual recordemos representa una matriz diagonal donde sus N_{orb} primeros términos correspondientes a la primera celda unitaria serán iguales a $\exp\left[i\frac{2\pi}{N}1\right]$, los siguientes N_{orb} términos de la diagonal serán iguales a $\exp\left[i\frac{2\pi}{N}2\right]$, y así sucesivamente, por lo tanto tenemos

$$\frac{1}{2\pi} \text{Im} \log \text{Det}(U_x) = \frac{1}{2\pi} \text{Im} \log \prod_{R=1}^N \prod_{j=1}^{N_{\text{orb}}} \exp\left[i\frac{2\pi}{N}R\right], \quad (2.36)$$

y realizando una descomposición similar a la realizada para la densidad de polarización p_x se obtiene fácilmente

$$\frac{1}{2\pi} \text{Im} \log \text{Det}(U_x) = \frac{N_{\text{orb}}(N+1)}{2}. \quad (2.37)$$

De esta manera podemos notar que la ec. 2.37 presenta casi la misma forma que el término que deseamos eliminar de la ec. 2.35, solamente nos faltaría dividir

para N_{orb} y multiplicar por N_o . Por lo tanto, es directo concluir que el término corrector es el siguiente

$$\frac{1}{2\pi} \text{Im} \log \text{Det}[(U_x^\dagger)^{N_o/N_{\text{orb}}}] = -\frac{N_o(N+1)}{2}. \quad (2.38)$$

Otra sutileza que vale la pena resaltar es que el determinante de U_x^\dagger es siempre igual a la unidad en los modelos que analizaremos en este proyecto, por lo tanto su logaritmo será siempre cero, provocando que el término corrector no realice ninguna función. Por este motivo primero debemos realizar la elevación a cada uno de los términos de la matriz diagonal U_x^\dagger y solo después proceder a calcular el determinante.

Por lo tanto, al sumar la ec. 2.35 con el término corrector de la ec. 2.38 obtendremos una expresión final para calcular la polarización eléctrica en aislantes cristalinos

$$P_{\text{elec}} = p_x e = \frac{e}{2\pi} \text{Im} \log \left(\text{Det}(U^\dagger U_x U) \text{Det}[(U_x^\dagger)^{N_o/N_{\text{orb}}}] \right). \quad (2.39)$$

Al considerar esta última expresión para calcular la polarización eléctrica en el modelo SSH, notamos que tal como esperábamos desaparecen las inconsistencias relacionadas a la paridad del número de celdas unitarias, como se muestra a continuación:

Fase trivial con N par

$$P_{\text{elec}} = 0 [e] \quad (2.40)$$

Fase topológica con N par

$$P_{\text{elec}} = 0.5 [e] \quad (2.41)$$

Fase trivial con N impar

$$P_{\text{elec}} = 0 [e] \quad (2.42)$$

Fase topológica con N impar

$$P_{\text{elec}} = 0.5 [e]. \quad (2.43)$$

2.7. Bombeo adiabático de carga

En esta sección describiremos el bombeo de carga electrónica (charge pumping) en aislantes cristalinos, producido mediante deformaciones adiabáticas en el Hamiltoniano. Es decir, introducimos en el Hamiltoniano un potencial que varíe lentamente, ya que esto se aproxima a un proceso adiabático.

El bombeo adiabático de carga fue concebido por David Thouless en 1983 [9] donde demostró que bandas energéticas completamente llenas pueden generar transporte de carga cuando el Hamiltoniano depende del tiempo de manera periódica, pero en un proceso adiabático, concluyendo que para un periodo completo el transporte estará cuantizado en un número entero de electrones. En el modelo SSH utilizaremos el bombeo de carga de Thouless para comprobar dicha cuantización, haciendo uso de los centros de Wannier, con la finalidad de observar de manera explícita el transporte electrónico adiabático. Para lo cual explicaremos brevemente como construir el Hamiltoniano del modelo SSH en el espacio del momento, ya que explicar el bombeo de carga en el espacio recíproco es pedagógicamente favorable. Después regresaremos al espacio real para implementar los cambios a nuestro Hamiltoniano de la ec. 2.12.

Recordemos que el Hamiltoniano de la ec. 2.3 escrito en el espacio real presenta el contador de celdas unitarias $R = 1, 2, \dots, N$, mientras que el Hamiltoniano escrito en el espacio recíproco presentará el contador del vector de onda $k = \frac{2\pi}{N}1, \frac{2\pi}{N}2, \dots, 2\pi$. Por lo tanto para pasar del espacio real al espacio del momento podemos utilizar la transformada de Fourier

$$\begin{aligned} a_R &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k a_k e^{ikR} \\ a_R^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k a_k^\dagger e^{-ikR}, \end{aligned} \quad (2.44)$$

y de manera similar para b_R y b_R^\dagger . Reemplazando las transformadas de Fourier en la ec. 2.3 podemos escribir el Hamiltoniano como

$$H = \sum_k \begin{pmatrix} a_k^\dagger & b_k^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \gamma + \lambda e^{-ik} \\ \gamma + \lambda e^{ik} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix}. \quad (2.45)$$

Por lo tanto, la matriz del Hamiltoniano total en el espacio recíproco se puede escribir de manera general como

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & \gamma + \lambda e^{-ik} \\ \gamma + \lambda e^{ik} & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.46)$$

Escribir el Hamiltoniano en el espacio recíproco es conveniente para hacer uso de las matrices de Pauli, las cuales son matrices unitarias y hermitianas de orden 2x2 definidas como

$$\sigma_1 = \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.47)$$

$$\sigma_2 = \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (2.48)$$

$$\sigma_3 = \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.49)$$

Por lo tanto descomponiendo la exponencial de la ec. 2.46 en senos y cosenos, podemos escribir la matriz del Hamiltoniano en función de las matrices de Pauli

$$H(\mathbf{k}) = (\gamma + \lambda \cos(k))\sigma_1 + \lambda \sin(k)\sigma_2. \quad (2.50)$$

Esta última ecuación nos indica que el Hamiltoniano del sistema puede ser representado por un círculo de radio λ en eje σ_2 y centrado en γ en el eje σ_1 en el espacio construido por las matrices de Pauli (lo llamaremos Espacio de Pauli). Por facilidad al fijar $\lambda = 1$ simplemente estamos igualando el radio de los círculos a la unidad, con el fin de enfocarnos solo en la variación del centro γ para analizar los cambios de fase.

Además debido a la álgebra topológica del sistema (en la cual no ahondaremos, ya que esto sale del alcance del proyecto) deberemos considerar que en el origen de coordenadas del espacio de Pauli se ubica una carga topológica. A diferencia de la carga *ordinaria* que es consecuencia del teorema de Noether, que sostiene que para cada cantidad física conservada (carga) le corresponde una transformación matemática que no afecta las leyes físicas del sistema (simetría). La carga topológica por otra parte no corresponde a una simetría sino a una cuantización topológica del sistema. Dado que el modelo SHH presenta cuantización del dipolo eléctrico ($p \neq 0$ en la fase topológica y $p = 0$ en la fase trivial) podemos decir que la carga topológica estará relacionada a esta cuantización del sistema.

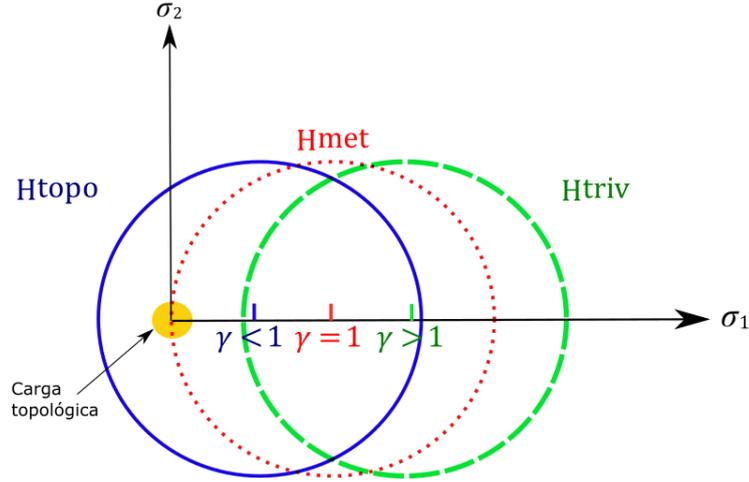


FIGURA 2.30: Hamiltoniano $H(\mathbf{k})$ del modelo SSH graficado en el espacio bi-dimensional de Pauli (σ_1, σ_2) . Fijando $\lambda = 1$ como el radio de los círculos y variando los centros γ de modo que el Hamiltoniano en la fase trivial H^{triv} ($\gamma > 1$) no encierra la carga topológica, mientras que el Hamiltoniano en la fase topológica H^{topo} ($\gamma < 1$) si la encierra, pero pasando siempre por el Hamiltoniano crítico H^{met} ($\gamma = 1$) correspondiente al punto metálico donde las bandas se cierran (*gapless*).

Por lo tanto, como se observa en la fig. 2.30, en el caso trivial cuando ($\gamma > 1$), el Hamiltoniano H^{triv} no podrá encerrar la carga topológica, resultando en una polarización igual a cero para la fase trivial. Cuando $\gamma = 1$, al ser $\gamma = \lambda$ estaremos en el punto metálico donde el Hamiltoniano H^{met} (o Hamiltoniano crítico) coincide con el origen de coordenadas donde posa la carga topológica, en el origen de coordenadas el Hamiltoniano dado por la ec. 2.50 será igual a cero, produciendo que desaparezca el *gap* energético. Mientras que en el caso topológico cuando ($\gamma < 1$) el Hamiltoniano H^{topo} encerrará sin problemas la carga topológica, resultado en una polarización distinta de cero para la fase no trivial, lo cual es completamente consistente con los resultados obtenidos previamente en el espacio real. Por lo tanto el Hamiltoniano de la ec. 2.50 escrito en el espacio del momento, representa exactamente al Hamiltoniano de la ec. 2.3 escrito en el espacio real, y ambos entregan los mismos resultados.

A continuación, para realizar el bombeo de carga en un aislante cristalino, lo primero que deberemos hacer es asegurarnos que los electrones se están moviendo siempre en las bandas de valencia, las cuales nunca deberán tener contacto con las bandas de conducción. Sin embargo, esto no ocurre en el punto metálico ($\gamma = 1$) donde las bandas se cierran. Por lo tanto, necesitamos encontrar una manera de pasar de la fase trivial a la fase topológica sin que el círculo (Hamiltoniano) toque el punto crítico. Esto es imposible en dos dimensiones, ya que no podemos pasar

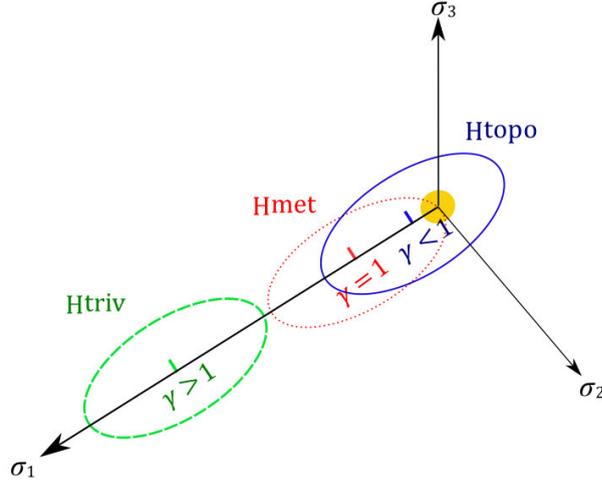


FIGURA 2.31: Hamiltoniano $H(\mathbf{k})$ del modelo SSH graficado en el espacio bidimensional de Pauli (σ_1, σ_2) , el cual al pasar de la fase topológica H^{topo} a la fase trivial H^{triv} , siempre tendrá que pasar primero por el punto crítico H^{met} . Por este motivo es necesario añadir la tercera dimensión de Pauli σ_3 .

del círculo azul-sólido al verde-entrecortado, sin pasar primero por el círculo rojo-punteado, por lo tanto necesitaremos añadir una tercera dimensión σ_3 para evitar tener un Hamiltoniano crítico, tal como se observa en la fig. 2.31.

Además para producir el bombeo de carga necesitamos que el Hamiltoniano dependa de forma cíclica tanto del vector de onda \mathbf{k} , como de un parámetro adiabático t (puede representar el tiempo), es decir necesitamos construir $H(\mathbf{k}, t)$. Por lo tanto, la mejor forma de cumplir la periodicidad de t ($t_i = t_f$), será construir al Hamiltoniano ya no como un círculo en dos dimensiones, sino como una superficie cerrada en 3 dimensiones.

Notemos además que $\sigma_3 = T_{\text{onsite}}$ de la ec. 2.11, es decir el término correspondiente al eje σ_3 representará a los términos *on-site*, por lo tanto usaremos de nuevo δ como la energía *on-site*. Por lo cual añadiendo este tercer término al Hamiltoniano de la ec. 2.50 y considerando $\lambda = 1$ podemos escribir el Hamiltoniano con bombeo de carga como

$$H^{\text{pump}}(\mathbf{k}, t) = (\gamma(t) + \cos(k))\sigma_1 + \sin(k)\sigma_2 + \delta(t)\sigma_3, \quad (2.51)$$

donde el término *on-site* $\delta\sigma_3$ también se encarga de romper la simetría de inversión y la simetría quiral del modelo SSH, tal como ocurría en el espacio real.

Como lo mencionamos anteriormente para realizar el bombeo de carga necesitamos que el Hamiltoniano también dependa periódicamente de t , es decir, deberá tener una forma *semejante* a una dona (decimos *semejante* porque no cumple

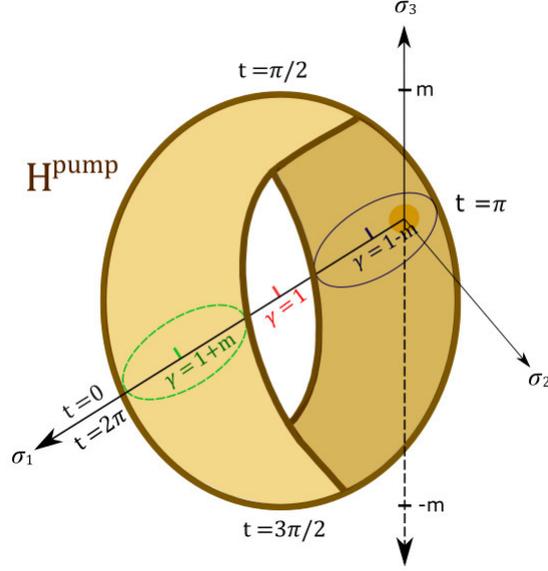


FIGURA 2.32: Hamiltoniano del modelo SSH con bombeo de carga $H^{\text{pump}}(\mathbf{k}, t)$ de la ec. 2.51 que adopta una forma *semejante* a una donut cuando se lo grafica en el espacio tridimensional de Pauli $(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$.

exactamente la ecuación de un toroide, pero esto es irrelevante dado que topológicamente una donut y una taza con mango son exactamente lo mismo, debido a que ambos poseen un *genus* o número de huecos igual a uno). Para lo cual podemos seguir fijando $\lambda = 1$, manteniendo el espesor de la donut constante mientras barreos los puntos horizontales de la donut variando γ y los puntos verticales variando δ , es decir, tanto γ como δ ahora dependerán de t y para que esta dependencia sea periódica utilizaremos senos y cosenos por facilidad. Por lo tanto podemos escribir dichas amplitudes como

$$\gamma(t) = m \cos(t) + 1 \quad (2.52)$$

$$\delta(t) = m \sin(t) \quad (2.53)$$

donde m tiene que ser un número mayor a cero. De esta manera ya podemos construir el Hamiltoniano con bombeo de carga, tal como se observa en la fig. 2.32.

Para entender mejor la parametrización de $\gamma(t)$ y $\delta(t)$ debemos evaluar el Hamiltoniano de la ec. 2.51 en distintos puntos t , dentro del intervalo $[0, 2\pi]$, por ejemplo cuando $t=0$ tenemos $\gamma = 1 + m$ y $\delta = 0$, lo cual corresponde al Hamiltoniano bidimensional que forma un círculo en la fase trivial, por contraste cuando $t = \pi$ tendremos $\gamma = 1 - m$ y $\delta = 0$, lo cual corresponde al Hamiltoniano bidimensional que forma un círculo en la fase topológica. Al utilizar una donut (en 3D) en vez de un círculo (en 2D) podemos evitar tener un Hamiltoniano crítico cuando $\gamma = \lambda$, ya que por la ec. 2.52 al igualar $\gamma = 1$ vemos que esto se cumple para dos

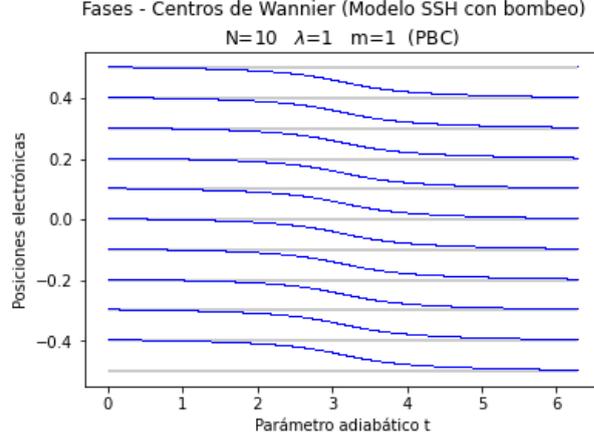


FIGURA 2.33: Centros de Wannier del Modelo SSH con bombeo de carga, donde todos los electrones se mueven una celda unitaria en un periodo de $t \in [0, 2\pi]$. Líneas grises representan los centros de cada celda unitaria.

valores de t : cuando $t = \frac{\pi}{2}$ o cuando $t = \frac{3\pi}{2}$, pero estos puntos ya no representan un problema ya que no producen un Hamiltoniano metálico, dado que en el punto crítico el Hamiltoniano se eleva gracias a la tercera dimensión de σ_3 , ya que para $t = \frac{\pi}{2}$ tenemos un valor $\delta = m \neq 0$ y para $t = \frac{3\pi}{2}$ tenemos $\delta = -m \neq 0$.

Finalmente debido a que las amplitudes γ , λ y δ representan exactamente lo mismo tanto en el espacio recíproco como en el real, podemos concluir que para realizar un bombeo de carga en el espacio real podemos seguir utilizando la ec. 2.12 y simplemente modular $\gamma(t)$ y $\delta(t)$ en un periodo de t de $[0, 2\pi]$, según la ec. 2.52 y la ec. 2.53 respectivamente, mientras mantenemos fijo $\lambda = 1$. Por lo tanto podemos escribir el Hamiltoniano con bombeo de carga listo para ser implementado en el espacio real como

$$H^{\text{pump}} = \gamma(t)(H_{12r}^{\text{intra}} + H_{r2l}^{\text{intra}}) + (H_{12r}^{\text{inter}} + H_{r2l}^{\text{inter}}) + \delta(t)H^{\text{onsite}}. \quad (2.54)$$

Realizando este procedimiento y obteniendo las fases de los valores propios de $\langle U_x \rangle$ podemos graficar los centros de Wannier como se muestra en la fig. 2.33, en este caso podemos observar que todos los electrones se desplazan una celda unitaria en un periodo de t . Esto también se puede observar al trabajar con $\langle U_x \rangle^N$ ya que de esta manera hacemos un “zoom” en una sola celda unitaria, como se muestra en la fig. 2.34, donde de manera consistente observamos que un electrón se traslada exactamente una celda unitaria en un periodo de t .

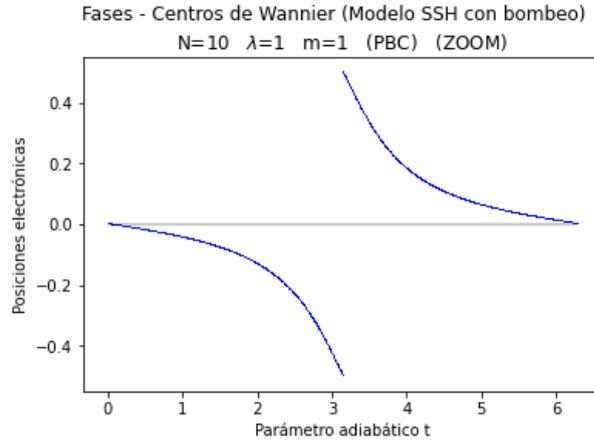


FIGURA 2.34: Centros de Wannier (de una sola celda unitaria) del Modelo SSH con bombeo de carga, donde el electrón se mueven una celda unitaria completa en un periodo de $t [0, 2\pi]$.

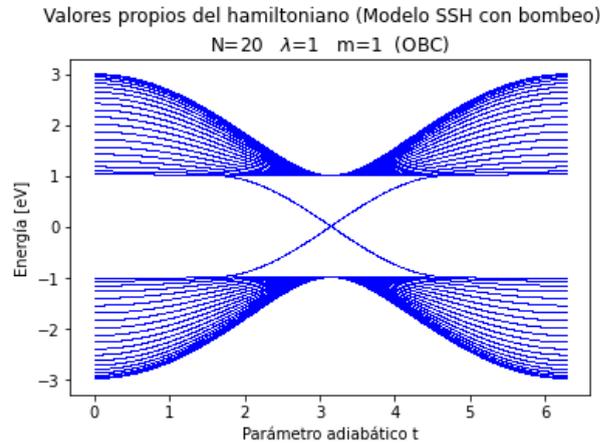


FIGURA 2.35: Espectro de energía del Modelo SSH con bombeo de carga en un periodo de t de $[0, 2\pi]$, donde las líneas entrecruzadas del medio corresponden a los estados de las fronteras del cristal.

Por último al implementar el Hamiltoniano con bombeo de carga en el espacio real podemos graficar las energías del sistema como se muestran en la fig. 2.35, donde se observa que el modelo SSH mantiene un *gap* constante y que nunca se cierra durante un intervalo de t y donde las líneas entrecruzadas del medio corresponden a los estados de las fronteras, es decir a los sitios de los extremos del cristal, ya que al aplicar PBC, dichas líneas desaparecen del espectro.

Capítulo 3

Modelo *tight-binding* QTI de un aislante cristalino bidimensional

En el presente capítulo describiremos e implementaremos el modelo bidimensional QTI haciendo uso de varias analogías con el modelo unidimensional SSH. También analizaremos los aspectos más relevantes tanto de las energías como de los estados del sistema. Finalmente explicaremos el procedimiento para calcular la polarización eléctrica, tanto en el interior del material como en sus bordes, por medio de los centros de Wannier.

3.1. Descripción del modelo bidimensional QTI

El modelo QTI, por sus siglas en inglés de *Quadrupole topological insulator*, representa a un aislante cristalino que posee un momento cuadrupolar cuantizado en su interior. Este modelo fue propuesto por Benalcazar, Bernevig y Hughes en 2017 [1] y a diferencia del modelo SSH, donde el dipolo eléctrico induce acumulaciones de carga en los extremos del aislante cristalino unidimensional, en el modelo QTI es el cuadrupolo eléctrico el responsable de inducir acumulaciones de carga en las esquinas y polarizaciones en los bordes del aislante cristalino bidimensional.

De manera análoga al modelo SSH que representa una red cristalina unidimensional con dos sitios (a,b) por celda unitaria y con N celdas unitarias en total, el modelo QTI representa una red cristalina bidimensional con cuatro sitios (a,b,c,d) por celda unitaria y con N_x celdas unitarias en el eje horizontal y N_y celdas unitarias en el eje vertical, es decir, la red cristalina tendrá un total de $N_x N_y$ celdas

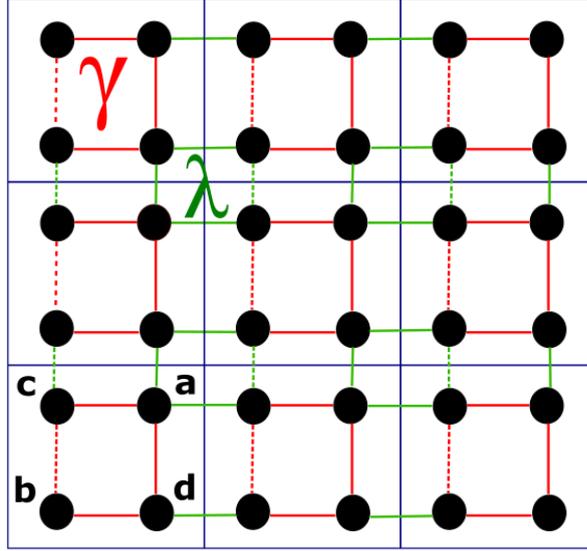


FIGURA 3.1: Esquema del modelo *tight-binding* QTI con probabilidad de transición intra-cell γ (líneas rojas) e inter-cell λ (líneas verdes). Líneas entrecortadas representan hoppings negativos.

unitarias. Pero por facilidad, en este proyecto utilizaremos $N_x = N_y = N$, siendo N el número de celdas unitarias por lado y por lo tanto tendremos una red cristalina cuadrada que tendrá N^2 celdas unitarias en total. Además, en este modelo γ continúa siendo la amplitud de probabilidad de transición del electrón dentro de la misma celda unitaria (intra-cell) y λ la amplitud de probabilidad de transición del electrón entre celdas vecinas (inter-cell). Con la finalidad de observar fácilmente ciertas características relevantes del modelo, sin interferir con los resultados, enumeraremos los sitios (a, b, c, d) tal como se muestra en la fig. 3.1.

De manera similar al modelo SSH, el modelo QTI también tendrá *half-filling* para garantizar la neutralidad eléctrica del material, es decir, consideraremos solamente 2 electrones por celda unitaria. Además, cabe señalar que los hoppings graficados con líneas entrecortadas representan las mismas amplitudes, pero con signo negativo. Es decir, las líneas rojas sólidas representan la amplitud γ , mientras que las líneas rojas entrecortadas representan la amplitud $-\gamma$ y del mismo modo para los hoppings inter-cell λ . Estos hoppings negativos son introducidos con el único propósito de abrir el *gap* energético del sistema, con el objetivo de simular un aislante cristalino, ya que, si todos los hoppings fueran positivos, se cerraría el *gap* y siempre tendríamos un metal.

De manera análoga al modelo SSH, donde debíamos prestar especial atención a los sitios en los extremos del cristal unidimensional, para observar las propiedades emergentes del sistema. En el modelo QTI debemos prestar especial atención tanto

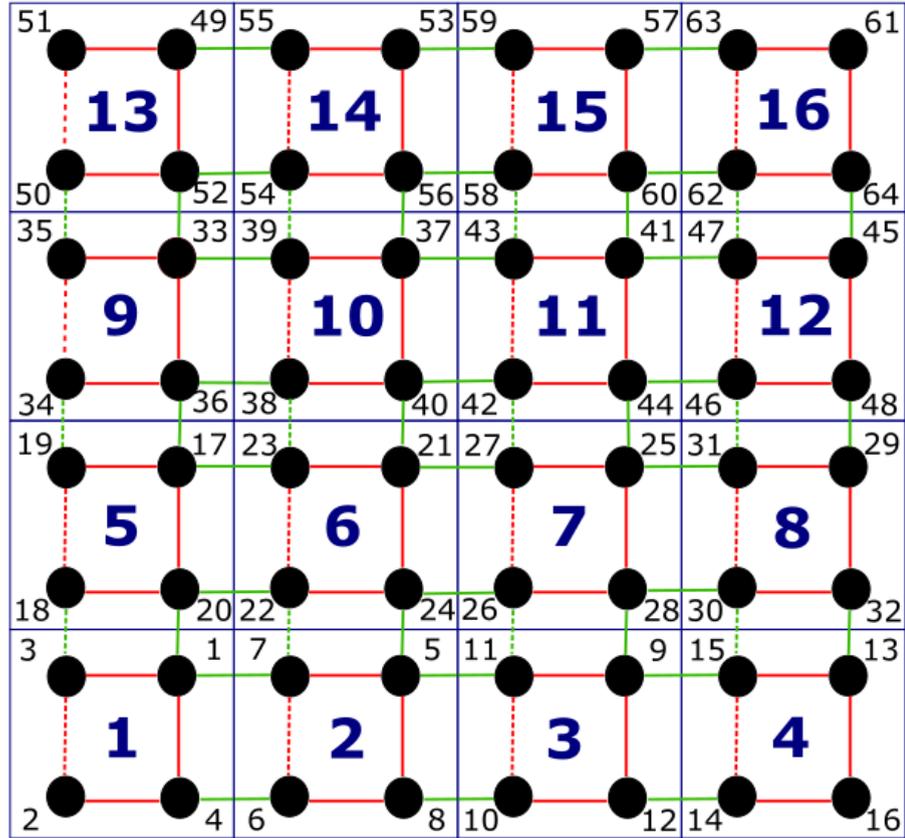


FIGURA 3.2: Esquema del modelo *tight-binding* QTI con $N = 4$ celdas unitarias por lado. Numeración en azul representa el orden de las celdas unitarias y numeración en negro representan el orden de los sitios de la red cristalina.

a los sitios de las esquinas como a los sitios de los bordes del cristal bidimensional. Para distinguir fácilmente estos sitios en la red cristalina, empezaremos analizando el modelo QTI con solo $N = 4$ celdas unitarias por lado, dando un total de $N^2 = 16$ celdas unitarias, que se enumerarán de izquierda a derecha y de abajo hacia arriba, tal como se muestra en la fig. 3.2. Al igual que lo hicimos en el modelo SSH, cuando sea necesario aumentaremos el número de celdas unitarias para mostrar los resultados más generales.

3.2. Implementación del Hamiltoniano

Para construir el Hamiltoniano del modelo QTI utilizaremos de nuevo la segunda cuantización, tal como lo hicimos en el modelo SSH. Con la diferencia que ahora tendremos dos contadores de celdas unitarias (uno por cada eje) y además

tendremos términos negativos representados por los hoppings con líneas entrecortadas. Por lo tanto, podemos definir x como el contador de celdas unitarias en el eje horizontal y al contador de celdas unitarias en el eje vertical lo llamaremos y .

Por lo tanto, para construir el Hamiltoniano deberemos considerar los hoppings entre los sitios dentro de una misma celda unitaria, relacionados con la amplitud γ y los hoppings entre celdas unitarias vecinas, relacionados con la amplitud λ . De este modo podemos escribir el Hamiltoniano del modelo QTI en la segunda cuantización como

$$\begin{aligned}
H = & \sum_{x=1}^{N_x} \sum_{y=1}^{N_y} \gamma a_{x,y}^\dagger c_{x,y} + \gamma d_{x,y}^\dagger b_{x,y} + \gamma a_{x,y} d_{x,y} - \gamma c_{x,y}^\dagger b_{x,y} \\
& + \lambda c_{x+1,y}^\dagger a_{x,y} + \lambda b_{x+1,y}^\dagger d_{x,y} + \lambda d_{x,y+1}^\dagger a_{x,y} - \lambda b_{x,y+1}^\dagger c_{x,y} + H.c \quad (3.1)
\end{aligned}$$

donde los primeros 4 términos representarán las transiciones dentro de la misma celda unitaria (intra-cell). Por lo tanto, el primer término corresponderá a la transición entre los sitios c y a de izquierda a derecha, el segundo término corresponderá a la transición entre los sitios b y d de izquierda a derecha, el tercer término corresponderá a la transición entre los sitios d y a de abajo hacia arriba y el cuarto término corresponderá a la transición entre los sitios b y c de abajo hacia arriba y con signo negativo. Mientras que los siguientes 4 términos representarán las transiciones entre celdas unitarias contiguas (inter-cell). Por lo tanto, el quinto término corresponderá a la transición entre los sitios a y c de izquierda a derecha, el sexto término corresponderá a la transición entre los sitios d y b de izquierda a derecha, el séptimo término corresponderá a la transición entre los sitios a y d de abajo hacia arriba y el octavo término corresponderá a la transición entre los sitios c y b de abajo hacia arriba y con signo negativo. Por último, tendremos que añadir el transpuesto complejo de todos los términos anteriores para obtener las transiciones de derecha a izquierda y de arriba hacia abajo.

De la misma manera que lo hicimos con el Hamiltoniano del modelo SSH, podemos agrupar los términos de la ec. 3.1 y de este modo el Hamiltoniano del modelo QTI puede ser escrito exactamente en la forma de la ec. 2.4. Con la diferencia que para construirlo tendremos que considerar que las matrices de transición ahora serán del orden 4×4 , dado que tenemos 4 sitios por cada celda unitaria y las matrices de las conexiones o hoppings serán del orden $N^2 \times N^2$, dado que nuestra red cristalina ahora posee N^2 celdas unitarias en total. Por lo tanto, tomando en cuenta estas consideraciones ya podemos implementar el Hamiltoniano del modelo QTI, obteniendo así una matriz de orden $4N^2 \times 4N^2$.

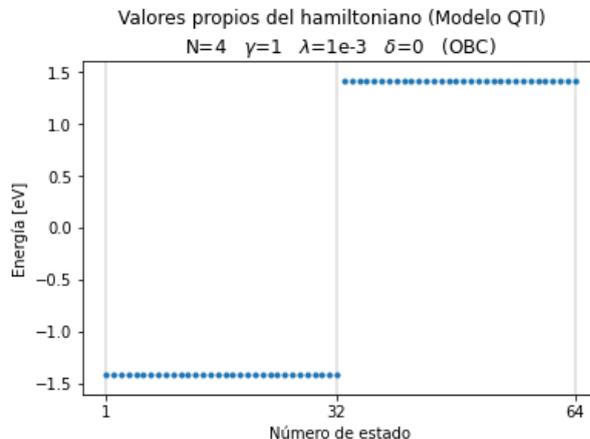


FIGURA 3.3: Valores propios del Hamiltoniano en la fase trivial.

3.3. Valores propios del Hamiltoniano

Al utilizar $N = 4$ celdas unitarias por lado, tendremos en total $N^2 = 16$ celdas unitarias totales y dado que existen 4 sitios por celda unitaria, tendremos $4N^2 = 64$ estados totales o grados de libertad en el sistema y por lo tanto al diagonalizar el Hamiltoniano del modelo QTI nos entregará también $4N^2 = 64$ valores y vectores propios. De esta manera al graficar los valores propios del Hamiltoniano en la fase trivial, observamos claramente que la mitad de los estados se encuentran ocupados y la otra mitad desocupados, separados por un *gap* de alrededor de $3eV$, tal como se muestra en la fig. 3.3. Cabe mencionar que los estados que parecen degenerados en el gráfico no poseen realmente las mismas energías, ya que se diferencian con alrededor de $1e-4$ eV, este valor es muy pequeño para observarlo en la gráfica, pero suficientemente grande para evitar que la computadora tome superposiciones de estados en los cálculos, como lo mencionamos en el anterior capítulo.

Mientras al graficar las energías del sistema en la fase topológica, tal como se muestra en la fig. 3.4, observamos que se mantiene un *gap* energético, pero en el centro del *gap* ahora se forman 4 estados con energía igual a cero, estos estados sí se encuentran degenerados ya que su diferencia es de $1e-15$ eV, la cual es prácticamente la precisión de la máquina. Debemos notar que en el modelo SSH teníamos 2 estados degenerados correspondientes a los 2 sitios de los extremos del cristal unidimensional, mientras que en el modelo QTI tenemos 4 estados degenerados correspondientes a los sitios de las 4 esquinas del cristal bidimensional, como lo comprobaremos más adelante.

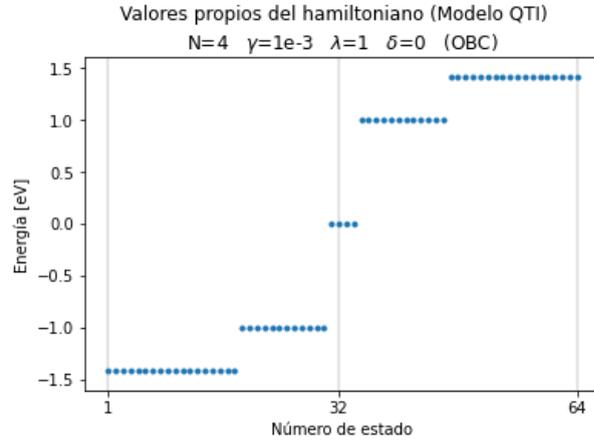


FIGURA 3.4: Valores propios del Hamiltoniano en la fase topológica (sin término *on-site* δ).

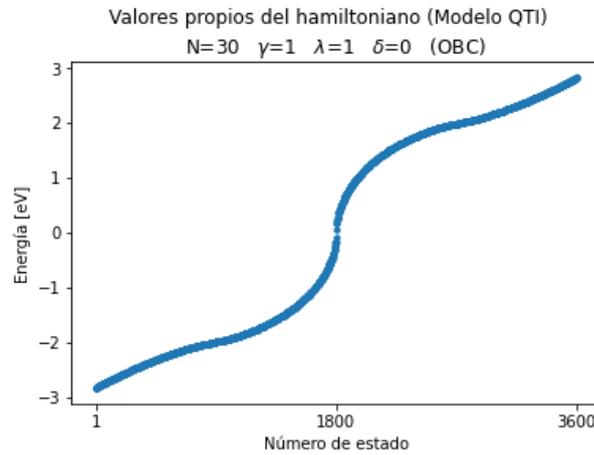


FIGURA 3.5: Valores propios del Hamiltoniano en el punto metálico.

Además, el modelo QTI también presenta un punto metálico cuando $\gamma = \lambda$, ya que en este caso las bandas se unen, produciendo que se cierre el *gap*, tal como se observa en la fig. 3.5.

Para eliminar la degeneración de los estados con energía cero, deberemos añadir al Hamiltoniano la contribución del término *on-site*, considerando ahora que la matriz T^{onsite} es de orden 4×4 , construida según como se muestra en la fig. 3.6 y de este modo el Hamiltoniano puede ser escrito exactamente en la forma de la ec. 2.12. Al realizar este procedimiento y volver a graficar los valores propios del Hamiltoniano en la fase topológica, observamos que los estados en energía cero se separan un poco entre sí, tal como se muestra en la fig. 3.7.

Al igual que ocurría con el modelo SSH donde la cuantización del dipolo eléctrico

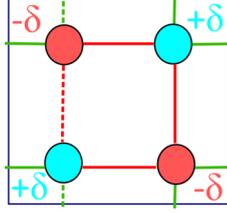


FIGURA 3.6: Esquema de las energías *on-site* δ en los sitios de la celda unitaria.

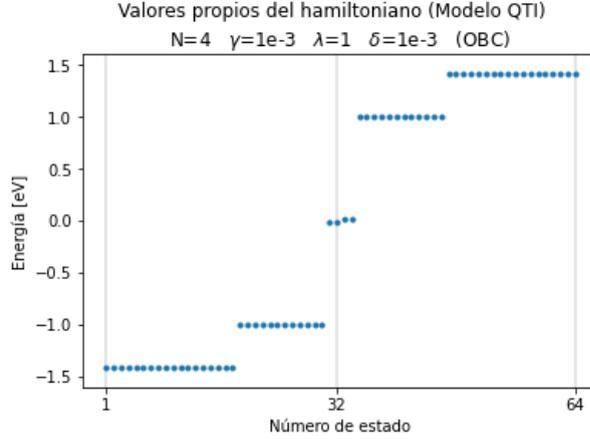


FIGURA 3.7: Valores propios del Hamiltoniano en la fase topológica (con término *on-site* δ).

estaba protegida por las simetrías del sistema, en el modelo QTI tenemos cuantizado tanto el momento dipolar como el momento cuadrupolar y dichas cuantizaciones también están protegidas por las simetrías del sistema. En el modelo QTI se evidencian fundamentalmente tres simetrías: la simetría de inversión, la simetría quiral y la simetría C_4 . Donde la primera cuantiza al dipolo eléctrico interno y las dos últimas cuantizan al cuadrupolo eléctrico interno. La simetría C_4 hace referencia a las simetrías de rotación $C_n = 360^\circ/n$, por lo tanto, el modelo QTI con PBC tendrá simetría C_4 ya que al realizar 4 rotaciones iguales (cada una de 90 grados) con centro en una celda unitaria cualquiera, regresamos a la misma red cristalina inicial. Al igual que ocurría con el modelo SSH, con la finalidad de deshacernos de los estados degenerados, pero no interferir demasiado en las cuantizaciones del sistema, el término *on-site* δ deberá seguir siendo muy pequeño (no mayor a $1e-3$ eV).

De igual manera podemos graficar el espectro de energía variando el hopping intra-cell γ y con un hopping inter-cell fijo $\lambda = 1$ con la finalidad de apreciar las transiciones entre las fases topológica y trivial en los puntos $\gamma = -1$ y $\gamma = 1$. De este modo también podemos apreciar la simetría del espectro respecto a la energía

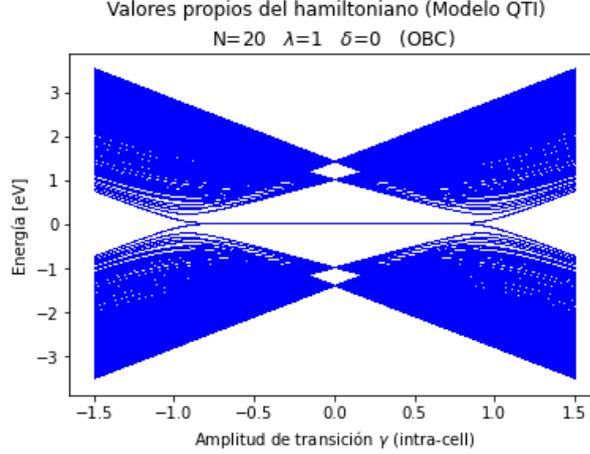


FIGURA 3.8: Espectro de energía en función de γ , con fase trivial en el intervalo: $-1.5 \leq \gamma < -1$ y $1 < \gamma \leq 1.5$, fase topológica en el intervalo: $-1 < \gamma < 1$ y energías en cero (línea horizontal) correspondientes a los estados degenerados en las esquinas del cristal.

ceros, lo cual es consecuencia de la simetría quiral, tal como se muestra en la fig. 3.8.

3.4. Vectores propios del Hamiltoniano

En el modelo QTI deseamos demostrar que los cuatro estados degenerados del sistema corresponden a los sitios de las cuatro esquinas del aislante cristalino. Para lo cual obtendremos las PDFs de estos cuatro estados del medio, que corresponden a las energías número 31, 32, 33 y 34 de la fig. 3.4. Al realizar este procedimiento observamos que dichos estados se encuentran ubicados en los sitios 2, 16, 51 y 61, tal como se muestra en la fig. 3.9, dichos sitios corresponden efectivamente a las 4 esquinas del cristal, tal como vimos en la fig. 3.2.

Además, calculando las PDFs de todos los estados del sistema, podemos verificar que, tanto en la fase trivial como en la topológica, el resto de los estados se encuentran deslocalizados, tal como se muestra en la fig. 3.10.

Para observar mejor la localización de los estados degenerados en las esquinas del cristal deberemos aumentar el número de celdas unitarias. Por ejemplo, cuando $N = 30$ tendremos $4N^2 = 3600$ sitios en la red cristalina, por lo tanto, los estados degenerados del medio corresponderán al número 1799, 1800, 1801 y 1802, al graficar las PDFs de estos estados se puede comprobar que, entre mayor número

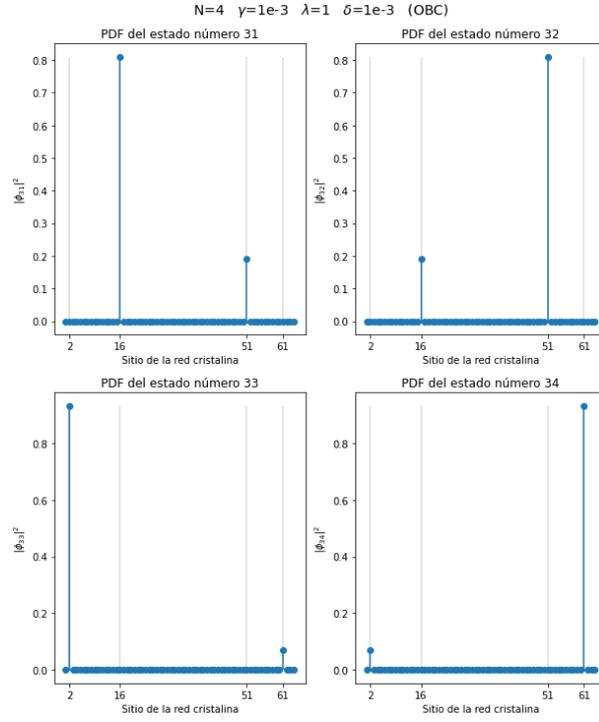


FIGURA 3.9: PDFs de los cuatro estados degenerados en la fase topológica, correspondientes a las energías 31, 32, 33 y 34 de la fig. 3.4, ubicados en los sitios 2,16,51 y 61 que corresponden a las esquinas de la red cristalina de la fig. 3.2 con 4 celdas unitarias por lado ($N = 4$).

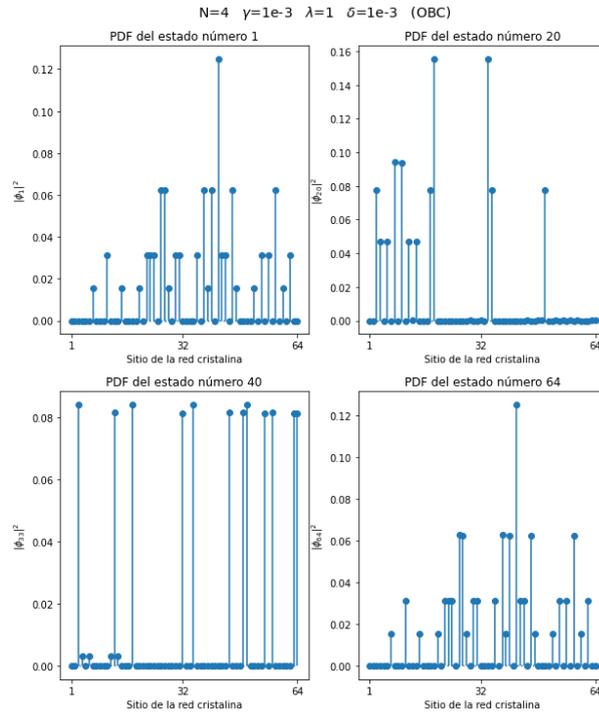


FIGURA 3.10: PDFs de los estados correspondientes a las energías 1, 20, 40 y 64 de la fig. 3.4 en la fase topológica, para una red cristalina con 4 celdas unitarias por lado ($N = 4$). (Estados deslocalizados).

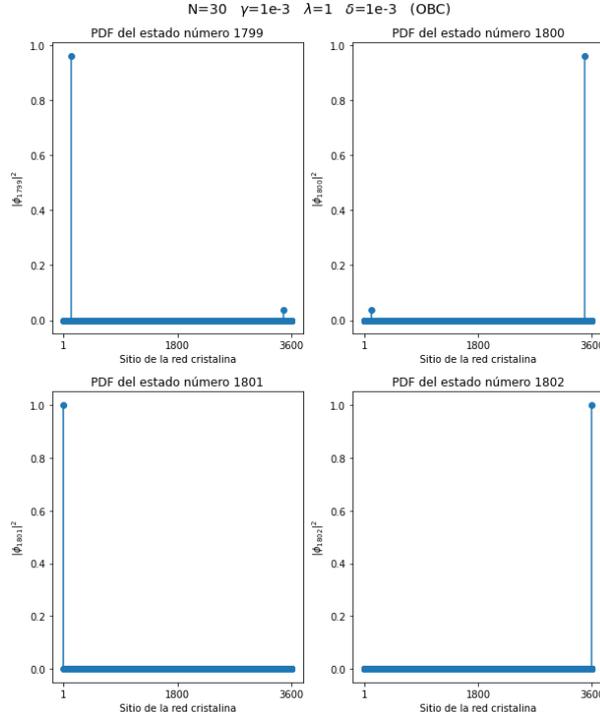


FIGURA 3.11: PDFs de los cuatro estados degenerados de la fase topológica en red cristalina con 30 celdas unitarias por lado ($N = 30$). Donde el primer estado corresponde a la segunda esquina, el segundo estado corresponde a la tercera esquina, el tercer estado corresponde a la primera esquina y el cuarto estado corresponde a la cuarta esquina del cristal. (Estados localizados).

de celdas unitarias, más localizados estarán los cuatro estados degenerados en las cuatro esquinas del cristal, tal como se observa en la fig. 3.11.

3.5. Polarizaciones superficiales y polarización interna

En el modelo QTI deseamos demostrar que el cuadrupolo eléctrico interno del material, además de inducir acumulaciones de carga en las esquinas del aislante, también induce polarizaciones en sus bordes, a las cuales nos referiremos como polarizaciones superficiales, tal como se mencionó en la fig. 1.4. Pero a diferencia del cálculo de la carga eléctrica que se obtiene directamente de la ec. 1.36, el cálculo de la polarización eléctrica, tanto en el interior como en los bordes del material requiere de un análisis un poco más profundo, como lo veremos en lo que resta de este capítulo.

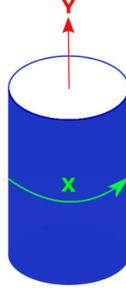


FIGURA 3.12: Forma cilíndrica de la red cristalina del modelo QTI al aplicar PBC en el eje X y OBC en el eje Y.

A continuación, explicaremos el procedimiento para calcular la polarización en los bordes horizontales del material (polarización en X), ya que realizando el mismo razonamiento podremos calcular la polarización en los bordes verticales (polarización en Y) de manera análoga. Como lo mencionamos anteriormente, para calcular los centros de Wannier sin que estos se distorsionen necesitamos aplicar PBC, por lo tanto, para calcular la polarización en el eje X deberemos aplicar PBC en el eje X y OBC en el eje Y, es decir, ahora nuestra red cristalina formará un cilindro, tal como se muestra en la fig. 3.12.

Pero antes de esto, lo primero que necesitamos para calcular la polarización superficial en X es construir el operador posición U_x , dado que la polarización eléctrica se calcula por medio de los centros de Wannier y estos últimos corresponden a las fases de los valores propios (con magnitud distinta de cero) del valor esperado del operador posición. De manera análoga al modelo SSH, donde el operador posición U_x correspondía a una matriz diagonal de orden $2N \times 2N$ con sus dos primeros elementos de la diagonal iguales a $e^{\frac{2\pi}{N}1}$, los siguientes dos elementos iguales a $e^{\frac{2\pi}{N}2}$, y así sucesivamente, dado que los 2 primeros sitios se encontraban en la primera celda unitaria, los siguientes 2 en la segunda y así sucesivamente. Ahora el operador posición U_x para el modelo QTI corresponderá a una matriz diagonal de orden $4N^2 \times 4N^2$ donde los 4 primeros elementos de la diagonal serán iguales a $e^{\frac{2\pi}{N_x}1}$, los siguientes 4 elementos serán iguales a $e^{\frac{2\pi}{N_x}2}$, y así sucesivamente, dado que los 4 primeros sitios se encuentran en la primera celda unitaria de X, los siguientes 4 en la segunda y así sucesivamente. Recordemos además que por facilidad estamos trabajando con una red cristalina cuadrada, por lo tanto, se cumple la relación: $N_x = N_y = N$, siendo N el número de celdas unitarias por lado.

Por lo tanto, ya construido el operador posición U_x podemos calcular su valor esperado, por medio del operador proyector P_{occ} , notando que en este caso, el operador proyector se construirá con los $N_{occ} = 2N^2$ estados ocupados del sistema,

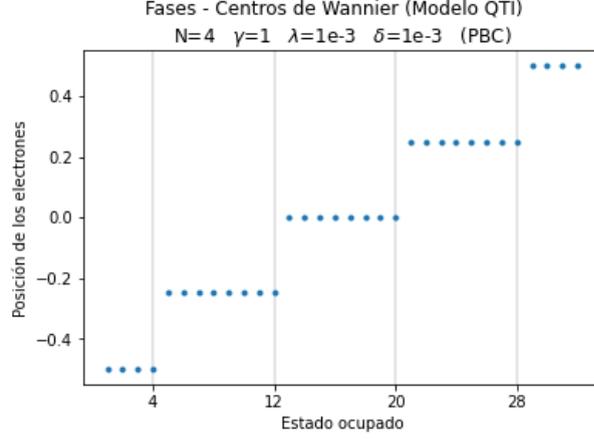


FIGURA 3.13: Centros de Wannier en la fase trivial con PBC en ambos ejes.

ya que el modelo QTI contiene 2 electrones por celda unitaria. De esta manera ya podremos calcular los centros de Wannier, considerando solamente los valores propios de $\langle U_x \rangle$ con magnitud igual a la unidad. Sin embargo, dado que el modelo QTI presenta $4N^2$ sitios en la red cristalina pero solamente $2N^2$ centros de Wannier o posiciones electrónicas, surge la pregunta de cómo distinguir entre los centros de Wannier que corresponden a los sitios de los bordes horizontales y los que corresponden a los sitios de los bordes verticales de la red cristalina, con la finalidad de calcular la polarización en X y la polarización en Y respectivamente, por separado.

Para explicar cómo realizar esta distinción utilizaremos una red cristalina con $N=4$ celdas unitarias por lado, en la cual procederemos a calcular los centros de Wannier con PBC en ambos ejes, es decir, con fronteras cerradas tanto en los bordes verticales como en los horizontales. Al realizar este procedimiento tanto en la fase trivial, tal como se muestra en la fig. 3.13, como en la fase topológica, tal como se muestra en la fig. 3.14, notamos que tenemos $2N^2 = 32$ centros de Wannier desplazados unos con respecto a otros, pero estas fases no nos dan información acerca de los bordes, ya que estamos utilizando PBC. Por lo tanto, sería más útil comparar estas fases con aquellas obtenidas aplicando PBC solo en el eje X y OBC en el eje Y.

Realizando este procedimiento podemos volver a calcular los centros de Wannier en la fase trivial, tal como se muestra en la fig. 3.15 y en la fase topológica, tal como se muestra en la fig. 3.16. Al comparar estas gráficas podemos notar que en la fase trivial no existe cambio alguno, pero en la fase topológica al utilizar OBC en Y observamos que se forman pares de centros de Wannier que se repiten de forma periódica. Estos 8 centros de Wannier, que corresponden a los números 4,

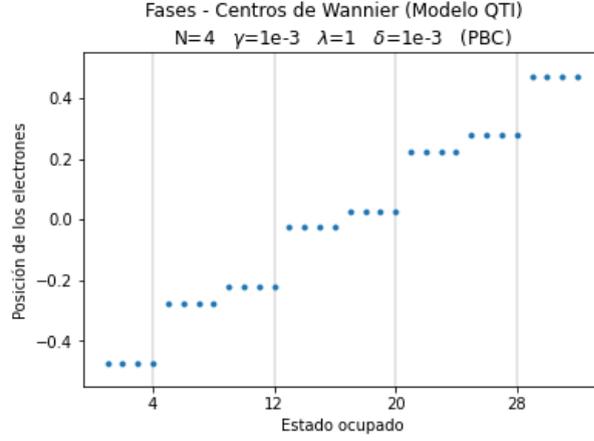


FIGURA 3.14: Centros de Wannier en la fase topológica con PBC en ambos ejes.

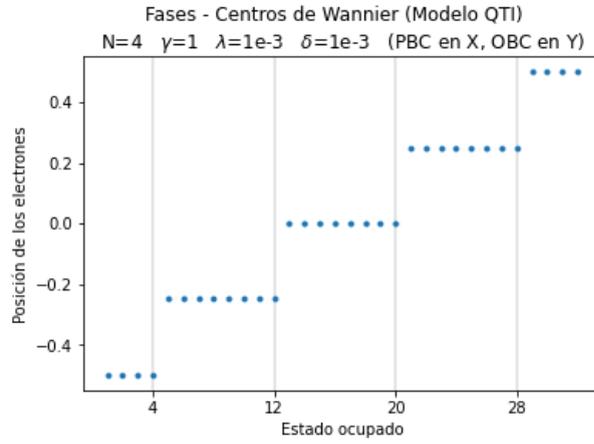


FIGURA 3.15: Centros de Wannier en la fase trivial con PBC en el eje X y OBC en el eje Y.

5, 12, 13, 20, 21, 28 y 29 de la fig. 3.16, nos llaman la atención ya que se forman justamente cuando abrimos fronteras en Y. Dado que estos centros de Wannier son obtenidos por medio de los valores propios de $\langle U_x \rangle$, podemos graficar también sus respectivos vectores propios para comprobar si efectivamente corresponden a las sitios de los bordes horizontales de la red cristalina.

Al graficar las PDFs de $\langle U_x \rangle$ correspondientes a estos cuatro primeros centros de Wannier: 4, 5, 12 y 13, podemos comprobar que corresponden a los sitios de la red cristalina número 8 y 10, 53 y 59, 12 y 14, 57 y 63, respectivamente, tal como se muestra en la fig. 3.17. Mientras que al graficar los PDFs correspondientes a los siguientes cuatro centros de Wannier: 20, 21, 28 y 29, podemos comprobar que corresponden a los sitios de la red cristalina número 2 y 16, 51 y 61, 4 y 6, 49 y 55, respectivamente, tal como se muestra en la fig. 3.18. Estos 16 sitios corresponden

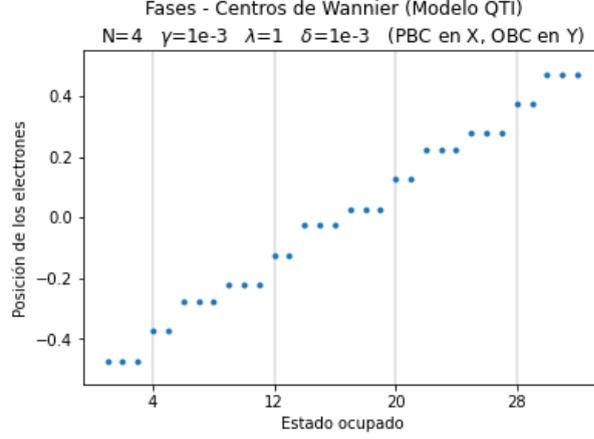


FIGURA 3.16: Centros de Wannier en la fase topológica con PBC en el eje X y OBC en el eje Y. Donde se observa la formación de pares de centros de Wannier en las posiciones 4, 5, 12, 13, 20, 21, 28 y 29, correspondientes a los bordes horizontales de la red cristalina.

justamente a los 8 sitios del borde superior y a los 8 sitios del borde inferior de nuestra red cristalina de la fig. 3.2.

De esta manera, por medio de la periodicidad con la que se repiten estos pares de centros de Wannier, podemos conocer con certeza los valores y vectores propios de $\langle U_x \rangle$ que corresponden a los bordes horizontales del material, lo cual nos servirá para calcular la polarización superficial en X. Finalmente como nos sugiere Resta en la ec. 1.46, la polarización eléctrica en aislantes cristalinos se puede escribir como la suma de sus centros de Wannier. Es decir, la polarización eléctrica macroscópica estará dada por la suma de los dipolos eléctricos de cada una de las celdas unitarias y dichos dipolos se manifiestan en los centros de Wannier. Para lo cual necesitaremos calcular los centros de Wannier respecto a una sola celda unitaria, es decir, necesitamos realizar el procedimiento del ZOOM, el cual consiste en calcular los centros de Wannier por medio de los valores propios de $\langle U_x \rangle^N$. Pero dado que ahora la matriz $\langle U_x \rangle$ es del orden $4N^2 \times 4N^2$, el procedimiento del ZOOM se vuelve computacionalmente muy demandante. Por lo tanto, con la finalidad de optimizar el procedimiento del ZOOM vamos a demostrar que elevar $\langle U_x \rangle$ a la N-ésima potencia es completamente equivalente a multiplicar por N los centros de Wannier.

Para realizar esta demostración comenzaremos con la definición de U_x , dada por la ec. 2.13

$$U_x = \sum_m |\Psi_m\rangle e^{i\frac{2\pi}{N}m} \langle \Psi_m|, \quad (3.2)$$

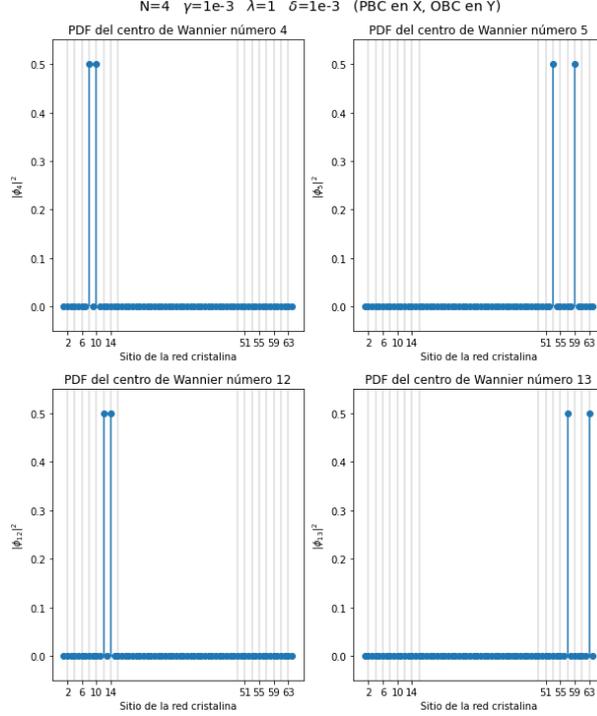


FIGURA 3.17: PDFs de $\langle U_x \rangle$ correspondientes a los centros de Wannier número 4, 5, 12 y 13, localizados en los sitios de la red cristalina número 8 y 10, 53 y 59, 12 y 14, 57 y 63, respectivamente, los cuales pertenecen a los bordes horizontales de la red cristalina de la fig. 3.2.

dado que la matriz U_x es diagonal, entonces los vectores Ψ deberán ser ortogonales

$$\langle \Psi_i | \Psi_j \rangle = \delta_{ij}. \quad (3.3)$$

Por lo tanto, si ahora elevamos U_x al cuadrado tenemos

$$\begin{aligned} U_x^2 &= (U_x)(U_x) = \left(\sum_m |\Psi_m\rangle e^{i\frac{2\pi}{N}m} \langle \Psi_m| \right) \left(\sum_n |\Psi_n\rangle e^{i\frac{2\pi}{N}n} \langle \Psi_n| \right) \\ &= \sum_m \sum_n |\Psi_m\rangle e^{i\frac{2\pi}{N}m} \langle \Psi_m | \Psi_n \rangle e^{i\frac{2\pi}{N}n} \langle \Psi_n|, \end{aligned} \quad (3.4)$$

aplicando la ortogonalidad de la ec. 3.3 tenemos

$$U_x^2 = \sum_m \sum_n |\Psi_m\rangle e^{i\frac{2\pi}{N}m} \delta_{nm} e^{i\frac{2\pi}{N}n} \langle \Psi_n|, \quad (3.5)$$

considerando ahora la propiedad de la delta de Kronecker: $\sum_j \delta_{ij} a_j = a_i$ obtenemos

$$U_x^2 = \sum_m |\Psi_m\rangle e^{i\frac{2\pi}{N}m} e^{i\frac{2\pi}{N}m} \langle \Psi_m|, \quad (3.6)$$

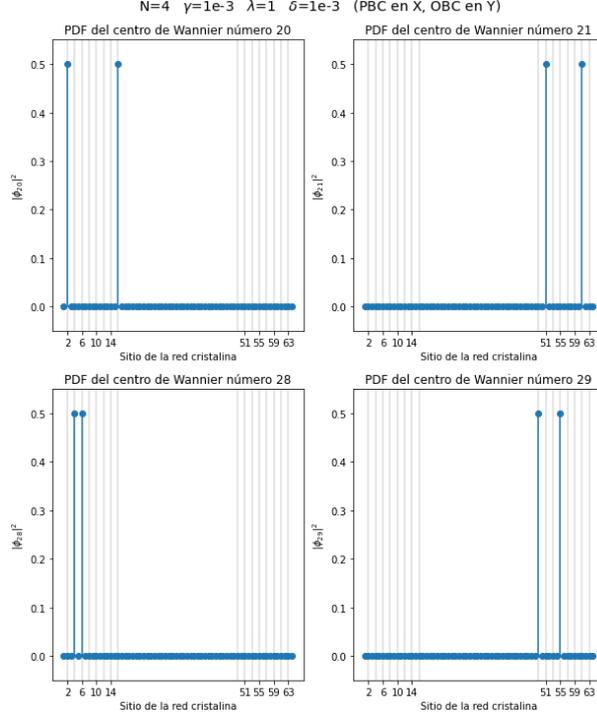


FIGURA 3.18: PDFs de $\langle U_x \rangle$ correspondientes a los centros de Wannier número 20, 21, 28 y 29, localizados en los sitios de la red cristalina número 2 y 16, 51 y 61, 4 y 6, 49 y 55, respectivamente, los cuales pertenecen a los bordes horizontales de la red cristalina de la fig. 3.2.

por lo tanto, la expresión de U_x elevada al cuadrado la podemos escribir como

$$U_x^2 = \sum_m |\Psi_m\rangle e^{i\frac{2\pi}{N}m^2} \langle \Psi_m|, \quad (3.7)$$

y si comparamos esta última expresión con la ec. 3.2, notamos que elevar U_x al cuadrado es análogo a elevar al cuadrado los términos de la diagonal de U_x , los cuales tienen forma exponencial. Por lo tanto, realizando los mismos pasos para la elevación a la N-ésima potencia de U_x llegamos a una identidad conocida

$$U_x^N = \sum_m |\Psi_m\rangle e^{i\frac{2\pi}{N}mN} \langle \Psi_m|. \quad (3.8)$$

Además, los centros de Wannier \bar{r} están codificados dentro de las fases del valor esperado del operador posición

$$\langle U_x \rangle = \langle P_{occ} | U_x | P_{occ} \rangle = \sum_{j=1}^{2N^2} |\psi_j\rangle \alpha e^{i\bar{r}_j} \langle \psi_j|, \quad (3.9)$$

donde $\alpha e^{i\bar{r}_j}$ representa los valores propios de $\langle U_x \rangle$. Pero recordemos que la mitad

de dichos valores propios tendrá magnitud $\alpha = 0$ y los valores propios que nos interesan tendrán magnitud $\alpha = 1$. De esta manera, por medio de la ec. 3.8 y la ec. 3.9 podemos concluir que elevar $\langle U_x \rangle$ a la N -ésima potencia es completamente equivalente a multiplicar por N todos los centros de Wannier \bar{r} , obtenidos de la diagonalización de $\langle U_x \rangle$

$$\langle U_x \rangle^N = \sum_{j=1}^{2N^2} |\psi_j\rangle e^{i\bar{r}_j N} \langle \psi_j|. \quad (3.10)$$

Por lo tanto, ahora que ya hemos optimizado el procedimiento para calcular los centros de Wannier respecto a una sola celda unitaria, podemos graficar los centros de Wannier (calculados por medio del procedimiento del ZOOM), aplicando PBC en X y OBC en Y, en función del hopping intra-cell γ con un hopping inter-cell fijo $\lambda = 1$, con la finalidad de observar de manera general el comportamiento de los centros de Wannier. Al realizar este procedimiento observamos que debido a la peculiaridad del modelo QTI que posee dipolos eléctricos localizados en los bordes del material, todos los centros de Wannier se ubican simétricos con respecto a cero, tal como se muestra en la fig. 3.19. Por lo tanto, al sumar los centros de Wannier, estos se anularán, sin aportarnos información alguna acerca del dipolo eléctrico que claramente observamos que se produce en la fase topológica. Este problema se soluciona al multiplicar los centros de Wannier por sus respectivas PDFs de $\langle U_x \rangle$, las cuales funcionan como un *peso* para cada uno de los centros de Wannier.

De esta manera concluimos que la polarización eléctrica estará dada por la suma de los productos de los centros de Wannier (obtenidos por medio del procedimiento del ZOOM) por sus respectivas PDFs de $\langle U_x \rangle$. Por lo tanto, si deseamos calcular la polarización superficial del material en X, deberemos utilizar PBC en X y OBC en Y, considerando solo los centros de Wannier correspondientes a los bordes horizontales de la red cristalina. De manera análoga, si deseamos calcular la polarización superficial del material en Y, deberemos utilizar PBC en Y y OBC en X, considerando solo los centros de Wannier correspondientes a los bordes verticales de la red cristalina. Y por último si deseamos calcular la polarización en el interior del material, deberemos utilizar PBC tanto en el eje X como en el eje Y, considerando ahora todos los centros de Wannier, como lo veremos en el siguiente capítulo.

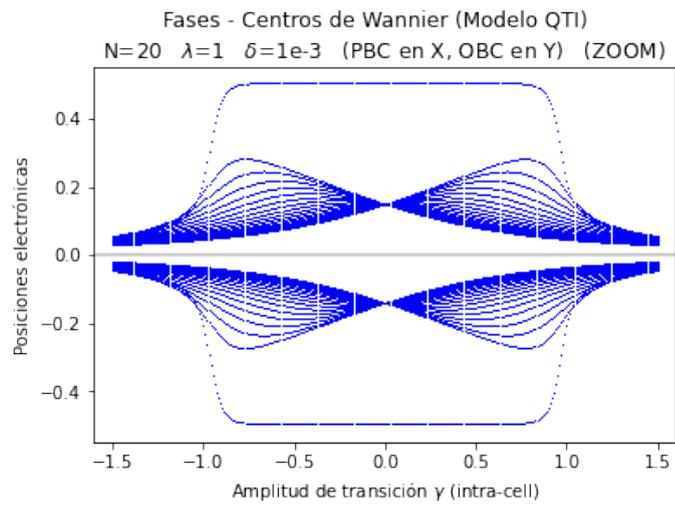


FIGURA 3.19: Centros de Wannier con PBC en X y OBC en Y, en función de γ , con fase trivial en el intervalo: $-1.5 \leq \gamma < -1$ y $1 < \gamma \leq 1.5$, fase topológica en el intervalo: $-1 < \gamma < 1$. Donde se observa que los centros de Wannier se ubican siempre simétricos respecto a cero y además se aprecia una acumulación de centros de Wannier en los extremos -0.5 y 0.5 en la fase topológica. Línea gris representa el centro de la celda unitaria.

Capítulo 4

Resultados y Análisis

4.1. Acumulación de carga en las esquinas del cristal bidimensional

Para calcular la carga eléctrica en el modelo QTI se hará uso de la ec. 1.36, que consiste en sumar las densidades de probabilidad de los $N_{\text{occ}} = 2N^2$ estados ocupados del sistema. Pero en este caso debemos notar que cada vector propio del Hamiltoniano tendrá $4N^2$ elementos, correspondientes a cada uno de los sitios de la red cristalina. Por este motivo al utilizar la ec. 1.36 para calcular la carga eléctrica obtendremos un vector de la misma dimensión, de modo que al sumar los 4 primeros términos obtendremos la carga eléctrica de la primera celda unitaria, los siguientes 4 valores nos darán la carga eléctrica de la segunda celda unitaria, y así sucesivamente. Por lo tanto, la mejor manera de visualizar la carga eléctrica en el cristal bidimensional, es ubicar las celdas unitarias en el plano horizontal (X,Y) y graficar el valor correspondiente a cada una de las celdas unitarias en el eje vertical Z, obteniendo así un gráfico tridimensional de la carga eléctrica.

Además, como vimos en el anterior capítulo, al calcular las energías en la fase topológica del modelo QTI sin término *on-site* δ , los cuatro estados en medio del *gap* se mantienen degenerados, tal como se mostró en la Figura 3.4. Por lo tanto, para evitar estos estados degenerados deberemos utilizar solamente los $N_{\text{occ}} - 2$ estados ocupados del sistema. Al realizar este procedimiento en la fase trivial observamos que la carga no se acumula en las esquinas del cristal, tal como se muestra en la fig. 4.1.

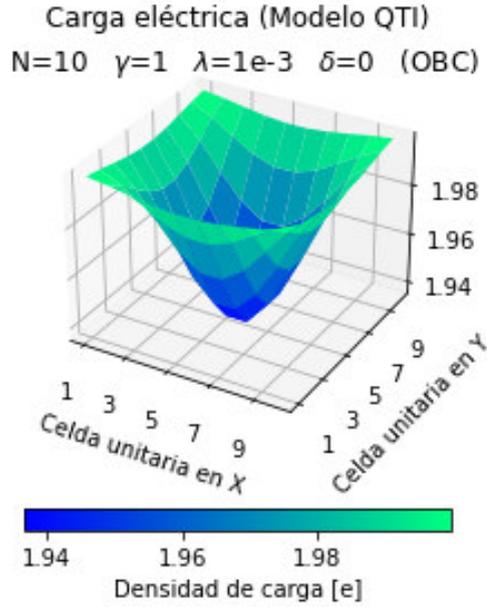


FIGURA 4.1: Carga eléctrica del cristal bidimensional del modelo QTI en la fase trivial, sin término *on-site* δ y con valor de γ lejano al valor de λ .

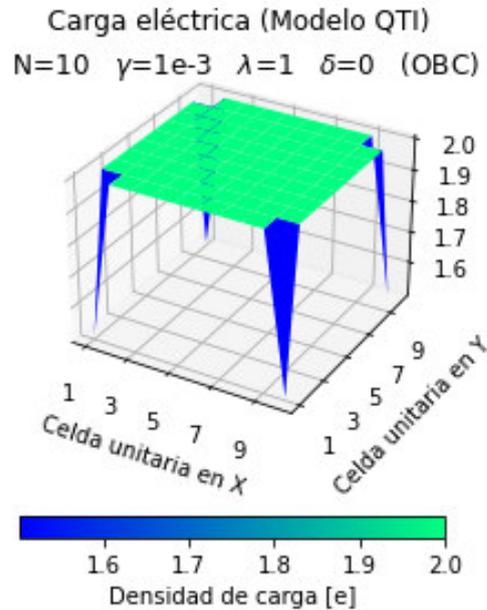


FIGURA 4.2: Carga eléctrica del cristal bidimensional del modelo QTI en la fase topológica, sin término *on-site* δ y con valor de γ lejano al valor de λ .

Pero al repetir el mismo procedimiento para la fase topológica observamos que se forman déficits de carga en las esquinas del cristal con un valor exacto de $0.5e$, tal como se muestra en la fig. 4.2.

Sin embargo, debemos recordar que estos cálculos no son completamente correctos, ya que no estamos considerando todos los estados ocupados del sistema,

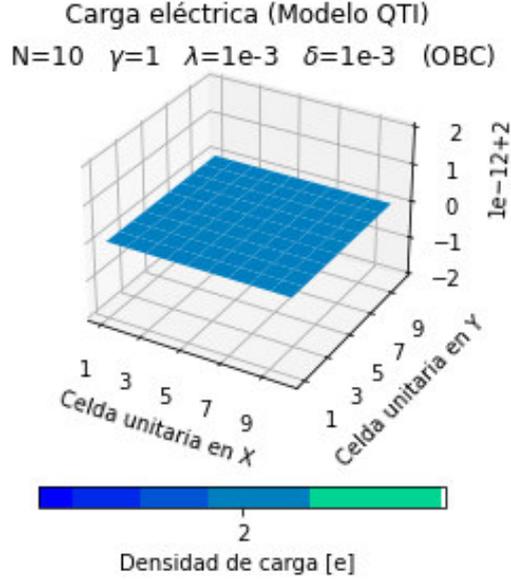


FIGURA 4.3: Carga eléctrica del cristal bidimensional del modelo QTI en la fase trivial, con término *on-site* $\delta = 1e - 3$ y con valor de γ lejano al valor de λ .

para poder utilizar la ec. 1.36 de forma completa debemos introducir el término *on-site* δ en nuestro Hamiltoniano con el fin de eliminar las degeneraciones. Al realizar este procedimiento en la fase trivial, tal como se muestra en la fig. 4.3, observamos que la carga eléctrica se mantiene en un valor de $2e$, pero como lo mencionamos anteriormente el valor entero de la carga no es relevante, ya que estos valores se anularán con las cargas enteras de los núcleos atómicos. Por este motivo lo que nos interesa es la parte fraccionaria o las desviaciones de la parte entera de la carga. En este caso se puede apreciar que dicho valor oscila en el orden de $1e-12$, es decir, prácticamente cero. De esta manera comprobamos que en la fase trivial el aislante bidimensional no presenta acumulaciones de carga, siendo así completamente neutro.

Repitiendo el mismo procedimiento para la fase topológica observamos que en las esquinas opuestas del cristal ahora sí se forman excedentes y déficits de carga con un valor exacto de $0.5e$, tal como se muestra en la fig. 4.4.

Cabe resaltar que en estos cálculos estamos considerando un valor de γ lejano al valor de λ , ya que entre ellos hay tres órdenes de magnitud que los separa. Esto lo hacemos con la finalidad de obtener resultados más limpios, ya que cuando el valor de γ es cercano al valor de λ (en el mismo orden de magnitud) las colas exponenciales de los estados se vuelven relevantes, tal como lo comprobamos en la fig. 2.10. Sin embargo, por motivos de completitud vamos a analizar lo que ocurre cuando tenemos valores de γ y λ cercanos entre sí. Al realizar este procedimiento

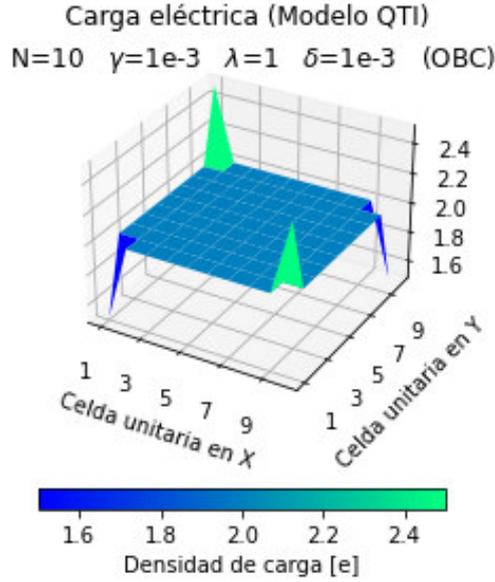


FIGURA 4.4: Carga eléctrica del cristal bidimensional del modelo QTI en la fase topológica, con término *on-site* $\delta = 1e - 3$ y con valor de γ lejano al valor de λ .

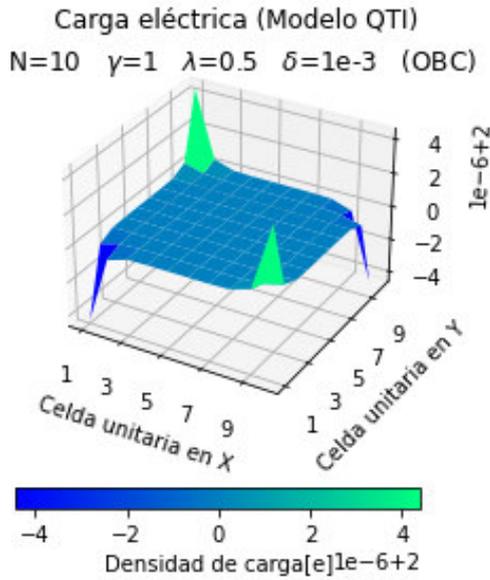


FIGURA 4.5: Carga eléctrica del cristal bidimensional del modelo QTI en la fase trivial, con término *on-site* $\delta = 1e - 3$ y con valor de γ cercano al valor de λ .

en la fase trivial observamos que las desviaciones de la parte entera ahora son del orden de $1e-6$, alejándose un poco del cero absoluto esperado, tal como se muestra en la fig. 4.5.

Al repetir este procedimiento para la fase topológica, tal como se muestra en la fig. 4.6, observamos que los excedentes y déficits de carga ya no se localizan exactamente en las celdas unitarias de las esquinas del cristal. Tal como lo esperábamos entre más cercanos sean los valores de γ y λ entre sí, las acumulaciones de carga

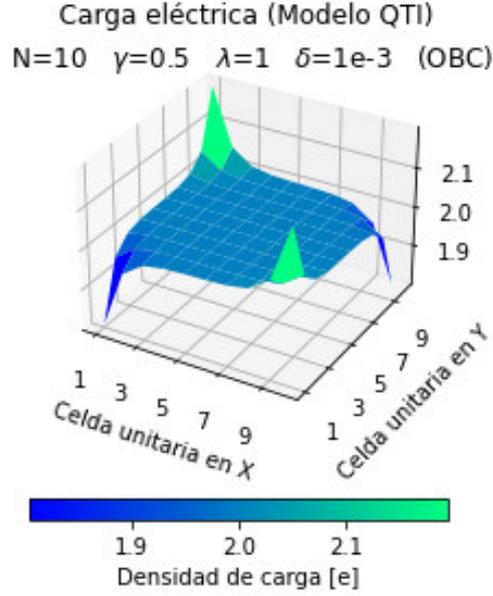


FIGURA 4.6: Carga eléctrica del cristal bidimensional del modelo QTI en la fase topológica, con término *on-site* $\delta = 1e - 3$ y con valor de γ cercano al valor de λ .

estarán menos localizadas en las esquinas, tal como se demostró en la fig. 2.10. Sin embargo, cabe resaltar que, al sumar la carga en cada cuadrante de la red cristalina por separado, volvemos a obtener los excedentes y déficits con valores exactos de $0.5e$.

Además, debemos recordar que el término *on-site* δ representa la energía intrínseca relacionada a cada sitio de la red cristalina e inicialmente el modelo QTI presenta energía *on-site* igual a cero. Este término solo fue introducido con la finalidad de evitar errores computacionales debido a las degeneraciones. Por este motivo podemos comprobar que al pasar de un valor de $\delta = 1e - 3$ a $\delta = 1e - 8$, dado que nos estamos acercando más a la energía *on-site* igual a cero que presenta el modelo originalmente, obtendremos resultados más precisos. Esto se observa en la fig. 4.7, donde en la fase trivial al utilizar los mismos valores de γ y λ de la fig. 4.5 las desviaciones de la parte entera de la carga pasan del orden de $1e-6$ al orden de $1e-11$, acercándose más al valor de cero absoluto esperado. Sin embargo, esto no quiere decir que podamos ubicar el valor de δ tan cerca de cero como queramos, ya que existe un piso (en alrededor de $\delta = 1e - 9$) debajo del cuál comienzan a presentarse los problemas de las degeneraciones antes mencionados, alterando así nuestros resultados.

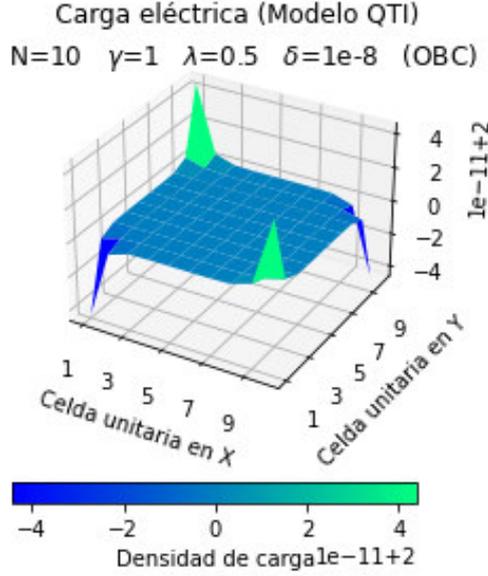


FIGURA 4.7: Carga eléctrica del cristal bidimensional del modelo QTI en la fase trivial, con término *on-site* $\delta = 1e - 8$ y con valor de γ cercano al valor de λ .

4.2. Polarización interna

Recordemos que para calcular la polarización eléctrica debemos sumar los productos de los centros de Wannier (obtenidos por medio del procedimiento del ZOOM) por sus respectivos vectores propios de $\langle U_x \rangle$. Pero dado que cada vector propio de $\langle U_x \rangle$ tiene $4N^2$ elementos, correspondientes a cada sitio de la red cristalina, obtendremos al final un vector de la misma dimensión. Por lo tanto, podemos realizar el mismo procedimiento que hicimos al calcular la carga eléctrica para obtener así un gráfico de la polarización en tres dimensiones.

Como lo mencionamos en el anterior capítulo para calcular la polarización interna del material debemos aplicar PBC tanto en el eje X como en el eje Y, considerando todos los centros de Wannier. Al realizar este procedimiento en la fase trivial observamos que los valores de la polarización interna (o en el bulk) son simétricos respecto a cero y por lo tanto al sumarlos se anularán, obteniendo un valor neto en el orden de $1e-14$, tal como muestra en la fig. 4.8.

De igual manera al repetir este procedimiento para la fase topológica observamos que los valores de la polarización interna son prácticamente cero (con respecto a la escala de $0.5e$) y además al sumarlos se obtiene de nuevo un valor en el orden de $1e-14$, tal como se muestra en la fig. 4.9.

A continuación, demostraremos que la polarización interna igual a cero era justamente el valor que esperábamos, dado que un cuadrupolo eléctrico interno

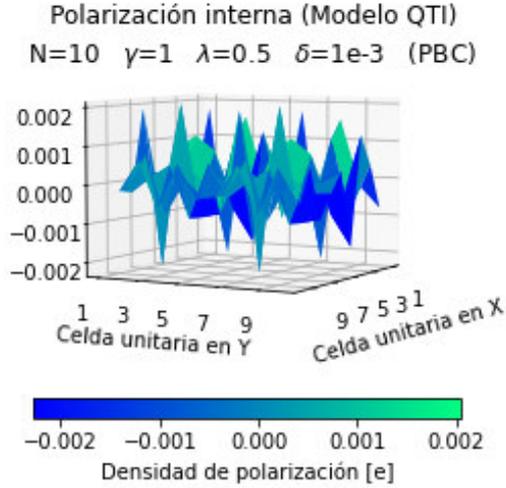


FIGURA 4.8: Polarización interna de la red cristalina del modelo QTI en la fase trivial.

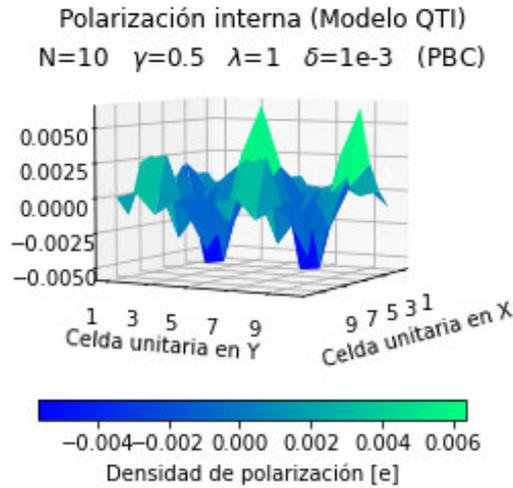


FIGURA 4.9: Polarización interna de la red cristalina del modelo QTI en la fase topológica.

solo está bien definido cuando el dipolo eléctrico interno es cero. Del mismo modo demostraremos que un dipolo eléctrico solo estará bien definido cuando la carga total sea cero, tal como sucede con un material eléctricamente neutro.

Para lo cual definiremos el monopolo, el dipolo y el cuadrupolo eléctrico según la ec. 1.17, la ec. 1.18 y la ec. 1.19, respectivamente.

Supongamos que partimos de un marco de referencia (X,Y) y lo trasladamos una distancia $\mathbf{R} = (R_x, R_y)$ de manera que ahora tenemos un nuevo marco de referencia (X',Y') , tal como se muestra en la fig. 4.10.

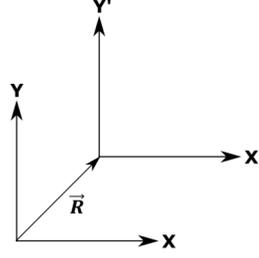


FIGURA 4.10: Marco de referencia inicial (X, Y) que al ser desplazado una distancia \mathbf{R} se convierte en un nuevo marco de referencia (X', Y') .

De esta manera podemos escribir las coordenadas del eje de referencia inicial (x, y) respecto a las nuevas coordenadas (x', y') como

$$x = x' - R_x \quad (4.1)$$

$$y = y' - R_y. \quad (4.2)$$

Por lo tanto, reemplazando la ec. 4.1 en la ec. 1.18 tenemos

$$p_x = \sum q_i x_i = \sum q_i (x'_i - R_x) = \sum q_i x'_i - R_x \sum q_i = p'_x - R_x Q^{\text{tot}}. \quad (4.3)$$

De esta manera se vuelve necesaria la condición de $Q^{\text{tot}} = 0$ para que el dipolo eléctrico este bien definido en todo marco de referencia, ya que solo de esta manera se cumple: $p_x = p'_x$.

Del mismo modo al reemplazar la ec. 4.1 y la ec. 4.2 en la ec. 1.19 obtenemos

$$\begin{aligned} q_{xy} &= \sum q_i x_i y_i = \sum q_i (x'_i - R_x)(y'_i - R_y) \\ q_{xy} &= \sum q_i x'_i y'_i - R_x \sum q_i x'_i - R_y \sum q_i y'_i + R_x R_y \sum q_i \\ q_{xy} &= q'_{xy} - R_x p'_x - R_y p'_y + R_x R_y Q^{\text{tot}}. \end{aligned} \quad (4.4)$$

De esta manera se vuelve necesaria las condiciones de $Q^{\text{tot}} = 0$ y $p'_x = p'_y = 0$ para que el cuadrupolo eléctrico este bien definido en todo marco de referencia, ya que solo de esta manera se cumple: $q_{xy} = q'_{xy}$.

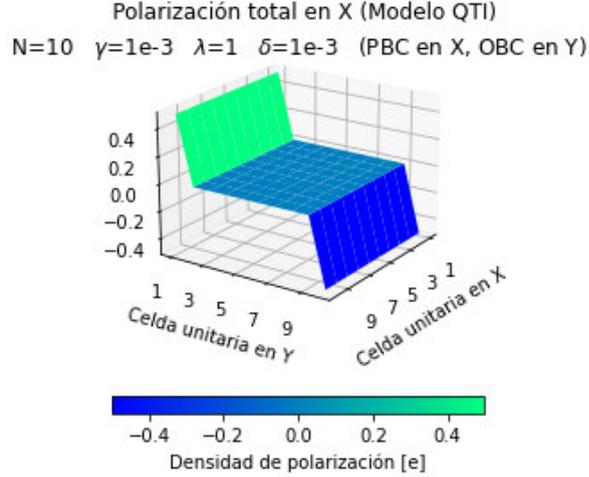


FIGURA 4.11: Polarizaciones de los bordes horizontales de la red cristalina del modelo QTI en la fase topológica, con término *on-site* $\delta = 1e - 3$ y con valor de γ lejano al valor de λ .

4.3. Polarizaciones superficiales

Como comprobamos al calcular la carga eléctrica, solo en la fase topológica se producen acumulaciones de carga en las esquinas del cristal, por lo tanto como se indicó en la fig. 1.4, en la fase trivial tendremos polarizaciones superficiales igual a cero. Por este motivo, realizaremos las gráficas de la polarización superficial en 3D solo para la fase topológica, ya que solo esta fase presenta valores no triviales.

Para calcular las polarizaciones superficiales solamente nos enfocaremos en el eje X, ya que al trabajar con una red cristalina cuadrada ($N_x = N_y = N$) se obtendrán exactamente los mismos valores en el eje Y.

Como se mencionó anteriormente para calcular la polarización en X deberemos aplicar PBC en X y OBC en Y, considerando solamente los centros de Wannier correspondientes a los bordes horizontales de la red cristalina. Sin embargo, como acabamos de comprobar la polarización interna es igual a cero, por lo tanto, podemos considerar todos los centros de Wannier, ya que obtendremos el mismo gráfico tridimensional. Al realizar este procedimiento observamos justamente que en el borde inferior del cristal se produce una polarización de $0.5e$ y en el borde superior se produce una polarización de $-0.5e$, tal como muestra en la fig. 4.11. Es necesario notar que tanto los resultados de las acumulaciones de carga en las esquinas del cristal, como lo resultados de las polarizaciones en los bordes del material concuerdan exactamente con lo mostrado en la fig. 1.4.

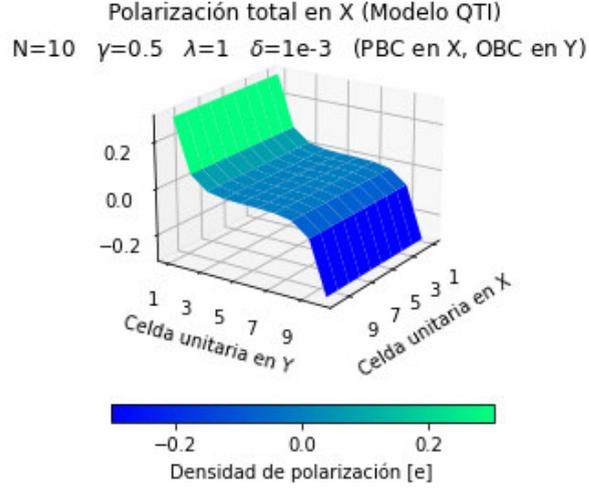


FIGURA 4.12: Polarizaciones de los bordes horizontales de la red cristalina del modelo QTI en la fase topológica, con término *on-site* $\delta = 1e - 3$ y con valor de γ cercano al valor de λ .

Además, al igual que ocurría con la carga eléctrica, si tomamos valores de γ y λ cercanos entre sí, notamos que las polarizaciones ya no están completamente localizadas en los bordes del material, tal como se muestra en la fig. 4.12. Sin embargo, cabe resaltar que al dividir la red cristalina en dos mitades, la polarización de la mitad inferior continuará siendo $0.5e$ y la polarización de la mitad superior continuará siendo $-0.5e$, como lo veremos a continuación.

4.4. Polarización promedio en el eje X

Para realizar un análisis más profundo acerca de las polarizaciones eléctricas superficiales y por consiguiente de las acumulaciones de carga en las esquinas del cristal, calcularemos las polarizaciones promedio en el eje X, respecto a las celdas unitarias del eje Y.

Para explicar este procedimiento tomaremos de ejemplo la red cristalina con 4 celdas unitarias por lado de la fig. 3.2. Al aplicar PBC en X y OBC en Y a nuestra red cristalina, tendremos un número infinito de celdas unitarias en el eje X, por este motivo calculamos la polarización de las celdas unitarias 1,2,3,4 y el valor promedio de estas polarizaciones lo escribimos como la polarización de la primera celda unitaria de Y, del mismo modo podemos calcular la polarización de las celdas 5,6,7,8 y el promedio de estos valores escribirlo como la polarización de la segunda celda unitaria de Y, y así sucesivamente. De este modo obtendremos las polarizaciones promedio en X respecto a las celdas unitarias en Y.

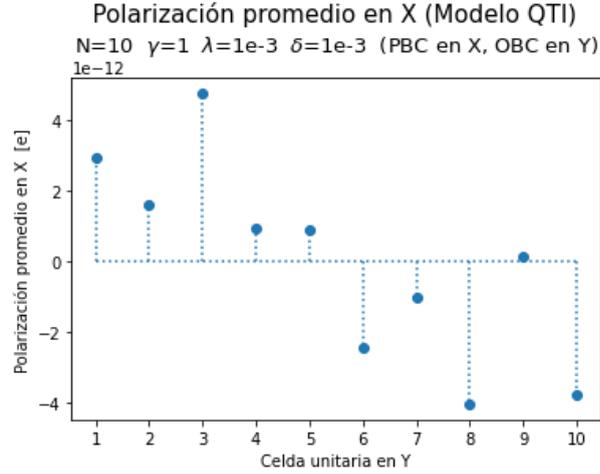


FIGURA 4.13: Polarización promedio de las filas de las celdas unitarias del modelo QTI en la fase trivial, con término *on-site* $\delta = 1e - 3$ y con valor de γ lejano al valor de λ .

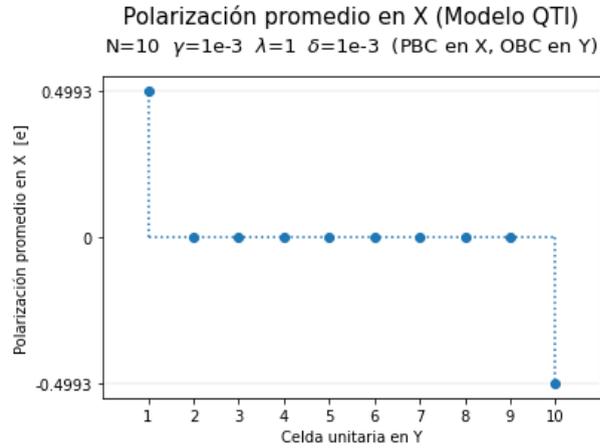


FIGURA 4.14: Polarización promedio de las filas de las celdas unitarias del modelo QTI en la fase topológica, con término *on-site* $\delta = 1e - 3$ y con valor de γ lejano al valor de λ .

Al realizar este procedimiento con valores de γ y λ lejanos entre sí y con $N=10$ número de celdas unitarias por lado, observamos que en la fase trivial la polarización promedio está en el orden de $1e-12$, es decir, prácticamente cero, tal como se muestra en la fig. 4.13.

Al realizar el mismo procedimiento en la fase topológica, tal como se muestra en la fig. 4.14, notamos que el borde inferior de la red cristalina presenta una polarización promedio de $0.5e$ y el borde superior una polarización promedio de $-0.5e$, lo cual corresponde exactamente a los valores obtenidos en la fig. 4.11.

Ahora por contraste, utilizaremos valores de γ y λ cercanos entre sí, de esta manera observamos que en la fase trivial la polarización promedio sube al orden

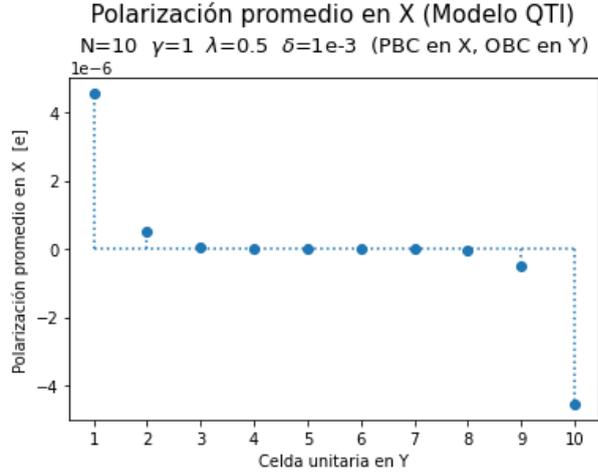


FIGURA 4.15: Polarización promedio de las filas de las celdas unitarias del modelo QTI en la fase trivial, con término *on-site* $\delta = 1e - 3$ y con valor de γ cercano al valor de λ .

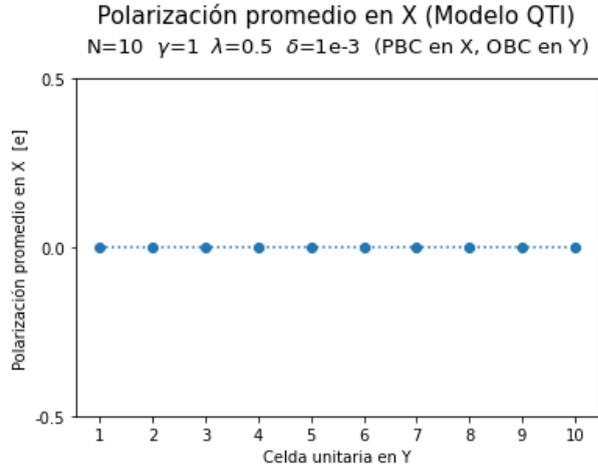


FIGURA 4.16: Polarización promedio de las filas de las celdas unitarias del modelo QTI en la fase trivial, con término *on-site* $\delta = 1e - 3$ y con valor de γ cercano al valor de λ . Respecto a la escala de los valores de las polarizaciones superficiales en la fase topológica.

de $1e-6$, tal como se muestra en la fig. 4.15. Sin embargo este valor sigue siendo despreciable en la escala de las polarizaciones superficiales de la fase topológica ($0.5e$), tal como se aprecia en la fig. 4.16.

Al repetir este procedimiento en la fase topológica tal como se muestra en la fig. 4.17, los primeros 5 valores deberían sumar $0.5e$ y los últimos 5 valores deberían sumar $-0.5e$. Sin embargo, la suma de cada mitad resulta en ± 0.401 debido a que estamos utilizando valores de γ y λ cercanos entre sí y con un número bajo de celdas unitarias ($N = 10$), pero como veremos más adelante este problema se soluciona al aumentar las celdas unitaria por lado a $N = 20$.

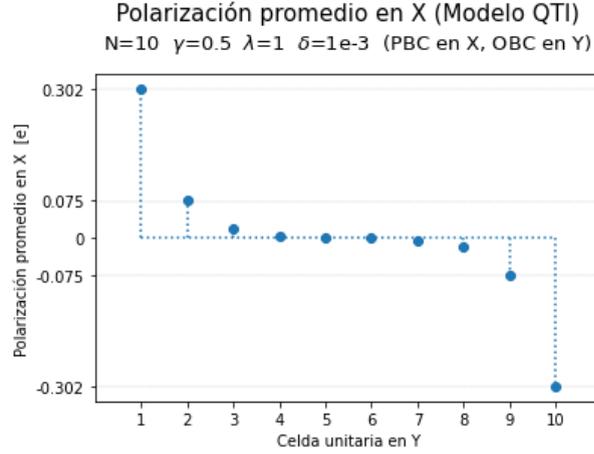


FIGURA 4.17: Polarización promedio de las filas de las celdas unitarias del modelo QTI en la fase topológica, con término *on-site* $\delta = 1e - 3$, con valor de γ cercano al valor de λ y con $N = 10$ celdas unitarias por lado.

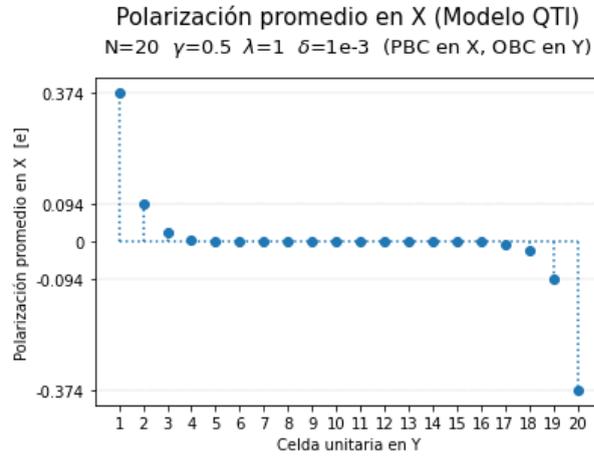


FIGURA 4.18: Polarización promedio de las filas de las celdas unitarias del modelo QTI en la fase topológica, con término *on-site* $\delta = 1e - 3$, con valor de γ cercano al valor de λ y con $N = 20$ celdas unitarias por lado.

Tal como lo estableció Resta en la ec. 1.46 para obtener el valor exacto de la polarización eléctrica en un aislante cristalino se debería considerar una longitud del cristal infinita y por lo tanto un número infinito de celdas unitarias. Por este motivo vamos a repetir el proceso anterior elevando las celdas unitarias a $N = 20$, de esta manera observamos que al sumar las polarizaciones promedio correspondientes a la mitad inferior y a la mitad superior de red cristalina, se obtiene $0.4991e$ y $-0.4991e$, respectivamente, tal como se muestra en la fig. 4.18.

De esta manera concluimos que el modelo QTI entrega los resultados correctos con una exactitud de 3 decimales al utilizar un número bajo de celdas unitarias ($N = 10$) pero con valores de γ y λ lejanos entre sí y además entrega la misma

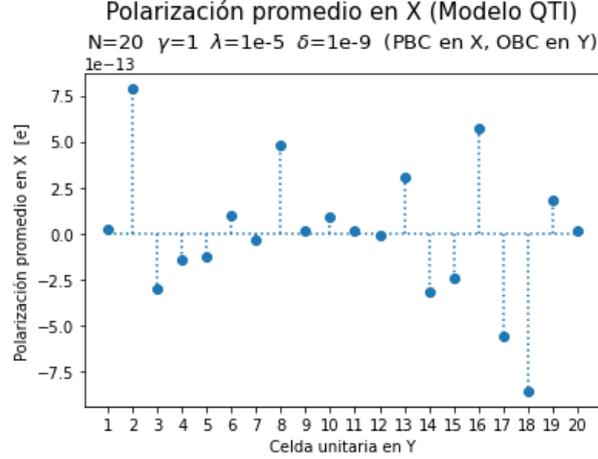


FIGURA 4.19: Polarización promedio de las filas de las celdas unitarias del modelo QTI en la fase trivial, con término *on-site* $\delta = 1e - 9$, con valor de γ muy lejano al valor de λ y con $N = 20$ celdas unitarias por lado.

exactitud al utilizar valores de γ y λ cercanos entre sí, pero con un número alto de celdas unitarias ($N = 20$).

Por lo tanto, es directo concluir que los resultados más precisos se obtendrán al combinar un número alto de celdas unitarias, con valores γ y λ muy lejanos entre sí (5 órdenes de magnitud de diferencia) y con una energía *on-site* muy cercana a cero ($1e-9$ eV). Al utilizar estos parámetros observamos que en la fase trivial las polarizaciones promedio disminuyen al orden de $1e-13$, tal como se muestra en la fig. 4.19.

Finalmente al repetir este proceso para la fase topológica se obtiene los valores esperados de $\pm 0.5e$ con una exactitud de 8 decimales, tal como se muestra en la fig. 4.20.

4.5. Cuadrupolo eléctrico interno

Como lo mencionamos en el primer capítulo, el cuadrupolo eléctrico lo calcularemos de forma analítica por medio de la ec. 1.33, haciendo uso de los resultados obtenidos previamente de las polarizaciones superficiales y de la acumulación de carga en la esquina del material, de este modo obtenemos los siguientes resultados.

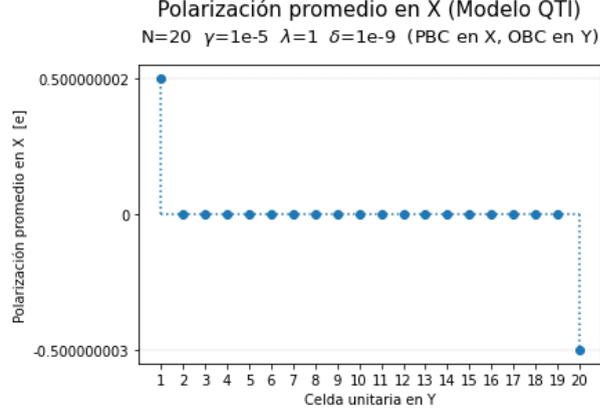


FIGURA 4.20: Polarización promedio de las filas de las celdas unitarias del modelo QTI en la fase topológica, con término *on-site* $\delta = 1e - 9$, con valor de γ muy lejano al valor de λ y con $N = 20$ celdas unitarias por lado.

Fase trivial

$$\begin{aligned}
 q_{xy} &= p_x^{\text{borde}} + p_y^{\text{borde}} - Q^{\text{esquina}} \\
 &= 0 + 0 - 0 = 0 [e]
 \end{aligned} \tag{4.5}$$

Fase topológica

$$\begin{aligned}
 q_{xy} &= p_x^{\text{borde}} + p_y^{\text{borde}} - Q^{\text{esquina}} \\
 &= 0.5 + 0.5 - 0.5 = 0.5 [e]
 \end{aligned} \tag{4.6}$$

De esta manera concluimos que el modelo QTI posee un momento cuadrupolar cuantizado de $0e$ en la fase trivial y de $0.5e$ en la fase topológica.

Sin embargo, de nuevo por motivos de completitud intentaremos obtener el cuadrupolo eléctrico de forma numérica. Para lo cual recordemos que para calcular el dipolo eléctrico en el eje X necesitamos definir el operador posición en X (U_x), dado por la ec. 2.13, el cual consiste en una matriz diagonal con sus valores no triviales dados por

$$U_x^{\text{diag}} = \exp \left[i \frac{2\pi}{N_x} R_x \right], \tag{4.7}$$

donde R_x representa el contador de celdas unitarias en el eje X, por lo tanto $R_x = 1, 2, \dots, N_x$.

Del mismo modo podemos calcular el cuadrupolo eléctrico en el plano (X,Y) construyendo un operador posición análogo (U_{xy}), tal como lo establecieron Wheeler, Wagner y Hughes en 2019 (ref. [12]), el cual también consiste en una matriz

diagonal con sus valores no triviales dados por

$$U_{xy}^{\text{diag}} = \exp \left[i \frac{2\pi}{N_x N_y} R_x R_y \right], \quad (4.8)$$

donde de manera análoga R_y representa el contador de celdas unitarias en el eje Y, es decir, $R_y = 1, 2, \dots, N_y$.

Por lo tanto para calcular el cuadrupolo eléctrico podemos seguir el mismo procedimiento que utilizamos para calcular el dipolo eléctrico, es decir, obtener las fases de los valores propios (con magnitud distinta de cero) de $\langle U_{xy} \rangle^{N_x N_y}$ y multiplicarlas por sus respectivos vectores propios de $\langle U_{xy} \rangle$.

Al realizar este procedimiento se obtienen las mismas inconsistencias relacionadas a la paridad del número de celdas unitarias que obteníamos al calcular la polarización en el modelo SSH. Lo cual nos hace pensar que debemos calcular el cuadrupolo eléctrico de manera análoga a la ec. 2.39 añadiendo el término corrector, tal como lo realizaron unos investigadores chinos en un artículo recientemente publicado en el año 2020 (ref. [13]), de esta manera podemos escribir el momento cuadrupolar con el término corrector como

$$q_{xy} = \frac{1}{2\pi} \text{Im} \log \left(\text{Det}(U^\dagger U_{xy} U) \text{Det}[(U_{xy}^\dagger)^{N_o/N_{orb}}] \right), \quad (4.9)$$

donde en el caso del modelo QTI dado que tenemos cuatro sitios y dos electrones por celda unitaria entonces se cumple $N_{orb} = 4$ y $N_o = 2$ y por lo tanto podemos escribir finalmente el momento cuadrupolar para el modelo QTI como

$$q_{xy} = \frac{1}{2\pi} \text{Im} \log \left(\text{Det}(U^\dagger U_{xy} U) \text{Det}(\sqrt{U_{xy}^\dagger}) \right). \quad (4.10)$$

Cabe mencionar que en la ref. [13], los autores no se percatan que el determinante del operador posición del cuadrupolo (U_{xy}) es siempre igual a la unidad, por lo tanto, la raíz cuadrada debe contener solamente al operador U_{xy} y no a todo el determinante como ellos proponen.

Finalmente, por medio de la ec. 4.10 podemos también calcular de forma numérica el momento cuadrupolar en el modelo QTI, obteniendo los valores de 0.5 para la fase topológica y 0 para fase trivial, sin importar la paridad de N_x o de N_y .

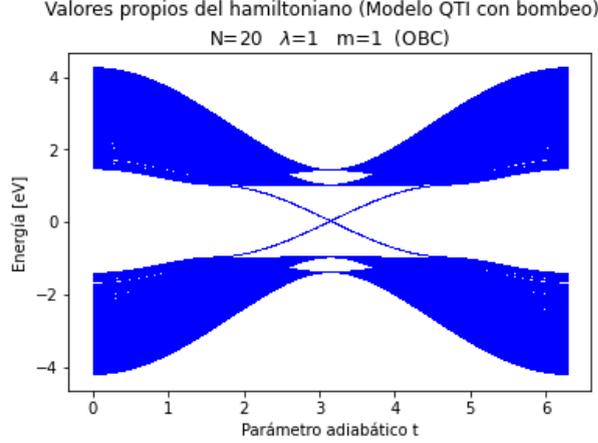


FIGURA 4.21: Energías del Hamiltoniano del modelo QTI con bombeo de carga respecto a un periodo completo del parámetro adiabático t .

4.6. Generalización de los resultados por medio del bombeo adiabático de carga

Como lo mencionamos en el primer capítulo, a diferencia del modelo SSH donde el bombeo carga de Thouless fue incorporado para observar de manera explícita el transporte adiabático electrónico, en el modelo QTI el bombeo de carga será incorporado con la finalidad de romper las simetrías del sistema que cuantizan al cuadrupolo eléctrico. De esta manera el momento cuadrupolar ya no tendrá valores cuantizados, sino que tomará valores continuos en un intervalo de $-0.5e$ a $0.5e$, siendo ésta la prueba final de que nuestros resultados de carga y polarización son correctos. Ya que si verificamos que se cumple la condición: $Q^{\text{esquina}} = p^{\text{borde}}$, tal como se estableció en la fig. 1.4, incluso cuando el momento cuadrupolar no está cuantizado, estaremos comprobando la exactitud de nuestro algoritmo.

Para incorporar el bombeo adiabático de carga en el modelo QTI realizaremos el mismo procedimiento realizado en el modelo SSH, es decir, escribiremos el Hamiltoniano con bombeo de carga H^{pump} tal como se indicó en la ec. 2.54 modulando $\gamma(t)$ y $\delta(t)$ según la ec. 2.52 y la ec. 2.53, respectivamente.

Al realizar este procedimiento podemos graficar los valores propios del Hamiltoniano H^{pump} respecto a un periodo completo del parámetro adiabático t , es decir, entre 0 y 2π . De este modo al igual que ocurría en el modelo SSH, observamos que la banda de valencia y la de conducción se mantienen separadas en todo momento, excepto cuando los estados de las fronteras las conectan, tal como se muestra en la fig. 4.21.

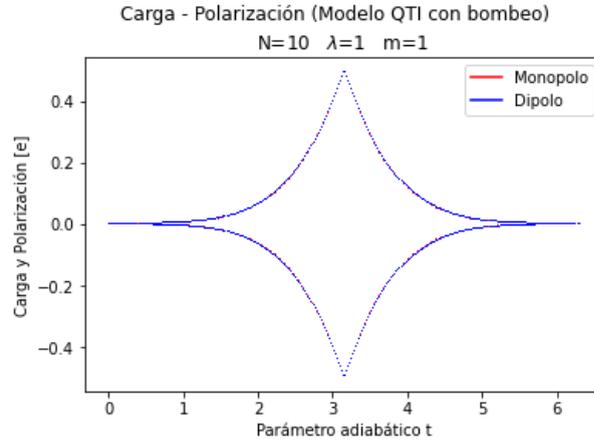


FIGURA 4.22: Monopolo y dipolo eléctrico del modelo QTI con bombeo de carga respecto a un periodo completo del parámetro adiabático t .

Del mismo modo podemos volver a calcular la carga y el dipolo eléctrico respecto al parámetro adiabático t , tal como se muestra en la fig. 4.22, donde observamos que tanto los valores de la carga eléctrica (color rojo) como los valores del dipolo eléctrico (color azul) se superponen completamente incluso con un valor bajo de celdas unitarias. De esta manera comprobamos que incluso cuando el momento cuadrupolar no se encuentra cuantizado, nuestros resultados del monopolo y del dipolo eléctrico son exactamente iguales, tal como lo predecía la teoría.

También podemos calcular el cuadrupolo eléctrico por medio de la ec. 4.10 respecto al parámetro adiabático t , de esta manera al graficar los valores del cuadrupolo eléctrico (color verde) junto a los valores del monopolo y del dipolo eléctrico observamos una superposición completa de los tres momentos multipolares, tal como se muestra en la fig. 4.23. De esta manera comprobamos que la ec. 1.33 predicha por la teoría se cumple siempre, incluso cuando el momento cuadrupolar no se encuentra cuantizado, lo cual garantiza la generalidad de los operadores utilizados en nuestro proyecto.

4.7. Resumen sobre los resultados más relevantes del proyecto

- La expresión de Resta para la polarización eléctrica no entregó resultados consistentes al considerar la paridad del número de celdas unitarias, por lo cual fue necesario añadir un término corrector que permitió calcular la polarización eléctrica de forma correcta sin importar la paridad del número de

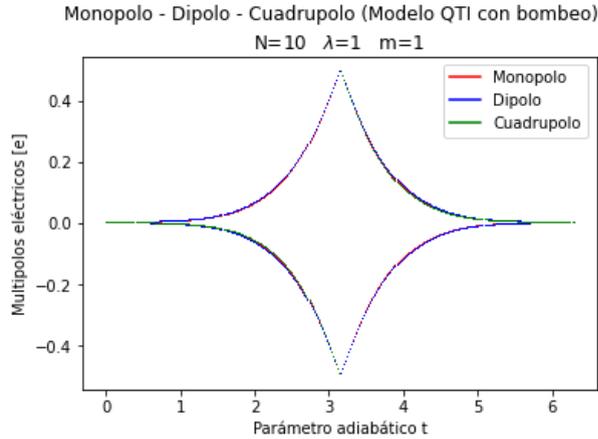


FIGURA 4.23: Monopolo, dipolo y cuadrupolo eléctrico del modelo QTI con bombeo de carga respecto a un periodo completo del parámetro adiabático t .

celdas unitarias. De igual manera fue posible calcular el cuadrupolo eléctrico por medio de un operador análogo al de Resta y añadiendo un término corrector que nos permitió obtener resultados consistentes independientemente de la paridad del número de celdas unitarias.

- El modelo QTI presentó dos regímenes aislantes tanto en la fase topológica ($|\gamma| < |\lambda|$) como en la trivial ($|\gamma| > |\lambda|$), separados por un punto metálico ($|\gamma| = |\lambda|$) donde se unen las bandas y desaparece el *gap*.
- En el cristal bidimensional fue necesario utilizar OBC en ambos ejes para calcular las acumulaciones de carga, dado que deseamos fronteras bien definidas para observar las propiedades emergentes en la superficie del material. Para calcular la polarización en los bordes horizontales del material fue necesario utilizar PBC en los bordes verticales y OBC en los bordes horizontales, ya que en este caso deseamos observar las propiedades emergentes en los bordes horizontales del cristal. Finalmente, para calcular el cuadrupolo eléctrico interno o la polarización eléctrica interna fue necesario aplicar PBC en ambos ejes, dado que no deseamos considerar los efectos producidos por la superficie del material.
- Cuando los valores de γ y λ son lejanos entre sí (3+ ordenes de magnitud de diferencia) se observó que las colas exponenciales de los estados son despreciables y por lo tanto los estados de la superficie se encuentran localizados, mientras que al acercar el valor γ al valor λ (en el mismo orden de magnitud) se observó que las colas exponenciales crecen, lo cual produce que los

estados de las esquinas y bordes del cristal comiencen a deslocalizarse, provocando así que las propiedades emergentes del sistema ya no se produzcan exactamente en las esquinas y bordes del material.

- El modelo QTI presentó en la fase topológica acumulaciones de carga de $\pm 0.5e$ en las esquinas del cristal al considerar un valor de γ lejano al valor de λ y también mostró acumulaciones de carga de $\pm 0.5e$ al sumar la carga en cada uno de los cuadrantes del cristal con un valor de γ cercano al valor de λ . Mientras que en la fase trivial el material no presentó acumulaciones de carga, es decir, el material es completamente neutro en la fase no topológica.
- El modelo QTI presentó en la fase topológica polarizaciones de $\pm 0.5e$ en los bordes del cristal al considerar un valor de γ lejano al valor de λ y también mostró polarizaciones de $\pm 0.5e$ al sumar la polarización de cada mitad de la red cristalina con un valor de γ cercano al valor de λ . Mientras que en la fase trivial el material no presentó polarizaciones en los bordes.
- Como se aprecia en la expresión para la polarización de Resta, para calcular correctamente los momentos multipolares se debe estar en el límite termodinámico, es decir, cuando el número de celdas unitarias tiende a infinito. Por esta razón fue necesario utilizar un número alto de celdas unitarias ($N \geq 20$) para obtener resultados consistentes cuando consideramos un valor de γ cercano al valor de λ .
- Los momentos multipolares fueron calculados con mayor precisión al combinar un número alto de celdas unitarias ($N \geq 20$), con valores de γ y λ muy lejanos entre sí (5+ ordenes de magnitud de diferencia) y con una energía *on-site* muy cercana a cero ($\delta = 1e-9$).
- Se comprobó analíticamente que el cuadrupolo eléctrico solamente está bien definido cuando el dipolo eléctrico es cero. Además, se comprobó numéricamente que al sumar la polarización interna de cada celda unitaria obtenemos el valor de cero, en el orden de precisión de la máquina.

Capítulo 5

Conclusiones

- Se comprobó numéricamente que el modelo QTI con cuadrupolo eléctrico cuantizado presenta polarizaciones en los bordes y acumulaciones de carga en las esquinas del cristal bidimensional, de manera análoga al modelo SSH con dipolo eléctrico cuantizado que presenta acumulaciones de carga en los extremos del cristal unidimensional.
- Los estados correspondientes a los bordes del cristal bidimensional conectaron la banda de valencia con la banda de conducción y por lo tanto se puede afirmar que el modelo QTI se comporta como un aislante cristalino en su interior y como un conductor en su superficie.
- El modelo QTI presentó en la fase topológica acumulaciones de carga de $\pm 0.5e$ en las esquinas del cristal. Mientras que en la fase trivial el material no presentó acumulaciones de carga, es decir, el material es completamente neutro en la fase no topológica.
- El modelo QTI presentó en la fase topológica polarizaciones de $\pm 0.5e$ en los bordes del cristal. Mientras que en la fase trivial el material no presentó polarizaciones en los bordes.
- Al romper las simetrías que protegen la cuantización del cuadrupolo eléctrico se comprobó que los tres primeros momentos multipolares mantienen siempre la misma magnitud, verificando así que los resultados numéricos son consistentes con los resultados analíticos incluso cuando el cuadrupolo eléctrico no se encuentra cuantizado, lo cual garantiza la generalidad de los operadores utilizados en nuestro proyecto.

Capítulo 6

Apéndice

6.1. Construcción de gráficas del modelo SSH

Pasos para la construcción de la gráfica 2D de los valores propios vs el número de estado

1. Construir el Hamiltoniano del modelo SSH con OBC
2. Diagonalizar el Hamiltoniano y obtener sus valores propios
3. Plotear los valores propios en orden ascendente

Pasos para la construcción de la gráfica 2D de los valores propios vs la amplitud de transición γ

1. Construir el Hamiltoniano del modelo SSH con OBC
2. Diagonalizar el Hamiltoniano con $\lambda = 1$ para un valor de γ fijo y obtener sus valores propios
3. Plotear los valores propios en forma vertical según su respectivo valor de γ
4. Repetir los 3 pasos anteriores para cada valor de γ dentro de un intervalo dado

Pasos para la construcción de la gráfica 2D del PDF de un estado vs el sitio de la red cristalina

1. Construir el Hamiltoniano del modelo SSH con OBC
2. Diagonalizar el Hamiltoniano y obtener sus valores y vectores propios
3. Ordenar los valores propios en orden ascendente y después ordenar los vectores propios en el orden de sus correspondientes valores propios
4. Elegir el vector propio de un estado fijo
5. Plotear el cuadrado del valor absoluto de la primera componente del vector propio y asignar dicho valor al primer sitio de la red cristalina
6. Repetir el último paso para todas las componentes restantes

Pasos para la construcción de la gráfica 2D de la acumulación de carga vs la celda unitaria

1. Construir el Hamiltoniano del modelo SSH con OBC
2. Diagonalizar el Hamiltoniano y obtener sus valores y vectores propios
3. Ordenar los valores propios en orden ascendente y después ordenar los vectores propios en el orden de sus correspondientes valores propios
4. Sumar el cuadrado del valor absoluto de la primera mitad de los vectores propios y obtener así un nuevo vector
5. Plotear la suma de las dos primeras componentes del nuevo vector y asignar dicho valor a la primera celda unitaria
6. Repetir el último paso para todas las componentes restantes

Pasos para la construcción de la gráfica 2D de los centros de Wannier vs el estado ocupado

1. Construir el Hamiltoniano del modelo SSH con PBC
2. Diagonalizar el Hamiltoniano y obtener sus valores y vectores propios

3. Ordenar los valores propios en orden ascendente y después ordenar los vectores propios en el orden de sus correspondientes valores propios
4. Construir el operador proyector de las bandas ocupadas con la primera mitad de los vectores propios
5. Construir el operador posición en X
6. Diagonalizar el operador posición en X y obtener sus valores propios no triviales
7. Plotear las fases de los valores propios divididas para 2π (modulo 1)

Pasos para la construcción de la gráfica 2D de los centros de Wannier vs la amplitud de transición γ

1. Construir el Hamiltoniano del modelo SSH con PBC
2. Diagonalizar el Hamiltoniano con $\lambda = 1$ para un valor fijo de γ y obtener sus valores y vectores propios
3. Ordenar los valores propios en orden ascendente y después ordenar los vectores propios en el orden de sus correspondientes valores propios
4. Construir el operador proyector de las bandas ocupadas con la primera mitad de los vectores propios
5. Construir el operador posición en X
6. Diagonalizar el operador posición en X y obtener sus valores propios no triviales
7. Plotear las fases de los valores propios divididas para 2π (modulo 1) en forma vertical según su respectivo valor de γ
8. Repetir los pasos anteriores para cada valor de γ dentro de un intervalo dado

Pasos para la construcción de la gráfica 2D de los centros de Wannier vs el parámetro adiabático t

1. Construir el Hamiltoniano del modelo SSH con PBC

2. Diagonalizar el Hamiltoniano para un valor fijo del parámetro adiabático t con PBC y obtener sus valores y vectores propios
3. Ordenar los valores propios en orden ascendente y después ordenar los vectores propios en el orden de sus correspondientes valores propios
4. Construir el operador proyector de las bandas ocupadas con la primera mitad de los vectores propios
5. Construir el operador posición en X
6. Diagonalizar el operador posición en X y obtener sus valores propios no triviales
7. Plotear las fases de los valores propios divididas para 2π (modulo 1) en forma vertical según su respectivo valor del parámetro adiabático t
8. Repetir los pasos anteriores para cada valor del parámetro adiabático t dentro de un intervalo dado

Pasos para la construcción de la gráfica 2D de los valores propios vs el parámetro adiabático t

1. Construir el Hamiltoniano del modelo SSH con OBC
2. Diagonalizar el Hamiltoniano para un valor fijo del parámetro adiabático t y obtener sus valores propios
3. Plotear los valores propios en forma vertical según su respectivo valor del parámetro adiabático t
4. Repetir los pasos anteriores para cada valor del parámetro adiabático t dentro de un intervalo dado

6.2. Construcción de gráficas del modelo QTI

Pasos para la construcción de la gráfica 3D de carga eléctrica vs las celdas unitarias en el eje X y las celdas unitarias en el eje Y

1. Construir el Hamiltoniano del modelo QTI con OBC en ambos ejes

2. Diagonalizar el Hamiltoniano y obtener sus valores y vectores propios
3. Ordenar los valores propios en orden ascendente y después ordenar los vectores propios en el orden de sus correspondientes valores propios
4. Sumar el cuadrado del valor absoluto de la primera mitad de los vectores propios y obtener así un nuevo vector
5. Plotear la suma de las cuatro primeras componentes del nuevo vector en el eje Z y asignar dicho valor a la intersección del plano XY de la primera celda unitaria en X y la primera celda unitaria en Y
6. Repetir el último paso para todas las componentes restantes

Pasos para la construcción de la gráfica 3D de la polarización interna vs las celdas unitarias en el eje X y las celdas unitarias en el eje Y

1. Construir el Hamiltoniano del modelo QTI con PBC en ambos ejes
2. Diagonalizar el Hamiltoniano y obtener sus valores y vectores propios
3. Ordenar los valores propios en orden ascendente y después ordenar los vectores propios en el orden de sus correspondientes valores propios
4. Construir el operador proyector de las bandas ocupadas con la primera mitad de los vectores propios
5. Construir el operador posición en X (con el procedimiento del ZOOM)
6. Diagonalizar el operador posición en X y obtener sus valores y vectores propios no triviales
7. Sumar el producto de las fases de los valores propios (divididas por 2π , modulo 1) por el cuadrado del valor absoluto de su respectivo vector propio para todos los estados del sistema y obtener así un nuevo vector
8. Plotear la suma de las cuatro primeras componentes del nuevo vector en el eje Z y asignar dicho valor a la intersección del plano XY de la primera celda unitaria en X y la primera celda unitaria en Y
9. Repetir el último paso para todas las componentes restantes

Pasos para la construcción de la gráfica 3D de la polarización total en X vs las celdas unitarias en el eje X y las celdas unitarias en el eje Y

1. Construir el Hamiltoniano del modelo QTI con PBC en el eje X y OBC en el eje Y
2. Diagonalizar el Hamiltoniano y obtener sus valores y vectores propios
3. Ordenar los valores propios en orden ascendente y después ordenar los vectores propios en el orden de sus correspondientes valores propios
4. Construir el operador proyector de las bandas ocupadas con la primera mitad de los vectores propios
5. Construir el operador posición en X (con el procedimiento del ZOOM)
6. Diagonalizar el operador posición en X y obtener sus valores y vectores propios no triviales
7. Sumar el producto de las fases de los valores propios (divididas por 2π , modulo 1) por el cuadrado del valor absoluto de su respectivo vector propio para los estados pertenecientes a los bordes horizontales del sistema y obtener así un nuevo vector
8. Plotear la suma de las cuatro primeras componentes del nuevo vector en el eje Z y asignar dicho valor a la intersección del plano XY de la primera celda unitaria en X y la primera celda unitaria en Y
9. Repetir el último paso para todas las componentes restantes

Pasos para la construcción de la gráfica 2D de la polarización promedio en el eje X vs las celdas unitarias en el eje Y

1. Construir el Hamiltoniano del modelo QTI con PBC en el eje X y OBC en el eje Y
2. Diagonalizar el Hamiltoniano y obtener sus valores y vectores propios
3. Ordenar los valores propios en orden ascendente y después ordenar los vectores propios en el orden de sus correspondientes valores propios

4. Construir el operador proyector de las bandas ocupadas con la primera mitad de los vectores propios
5. Construir el operador posición en X (con el procedimiento del ZOOM)
6. Diagonalizar el operador posición en X y obtener sus valores y vectores propios no triviales
7. Sumar el producto de las fases de los valores propios (divididas por 2π , modulo 1) por el cuadrado del valor absoluto de su respectivo vector propio para los estados pertenecientes a los bordes horizontales del sistema y obtener así un nuevo vector
8. Sumar las primeras cuatro componentes del nuevo vector y asignar dicho valor a la intersección de la primera fila y a la primera columna de la red cristalina
9. Repetir el último paso para todas las componentes restantes
10. Plotear el promedio de la primera fila del eje Y y asignar dicho valor a la primera celda unitaria en Y
11. Repetir el último paso para todas las filas del eje Y

Bibliografía

- [1] Wladimir A Benalcazar, B Andrei Bernevig, and Taylor L Hughes. Quantized electric multipole insulators. *Science*, 357(6346):61–66, 2017.
- [2] David J Griffiths. Introduction to electrodynamics, 2005.
- [3] Wladimir A Benalcazar, B Andrei Bernevig, and Taylor L Hughes. Electric multipole moments, topological multipole moment pumping, and chiral hinge states in crystalline insulators. *Physical Review B*, 96(24):245115, 2017.
- [4] Michael Victor Berry. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, 392(1802):45–57, 1984.
- [5] J Zak. Berry’s phase for energy bands in solids. *Physical review letters*, 62(23):2747, 1989.
- [6] David Vanderbilt and RD King-Smith. Electric polarization as a bulk quantity and its relation to surface charge. *Physical Review B*, 48(7):4442, 1993.
- [7] Raffaele Resta and David Vanderbilt. Theory of polarization: a modern approach. In *Physics of Ferroelectrics*, pages 31–68. Springer, 2007.
- [8] Raffaele Resta. Quantum-mechanical position operator in extended systems. *Physical Review Letters*, 80(9):1800, 1998.
- [9] DJ Thouless. Quantization of particle transport. *Physical Review B*, 27(10):6083, 1983.
- [10] W_P Su, JR Schrieffer, and Ao J Heeger. Solitons in polyacetylene. *Physical review letters*, 42(25):1698, 1979.
- [11] Nicola A Spaldin. A beginner’s guide to the modern theory of polarization. *Journal of Solid State Chemistry*, 195:2–10, 2012.

- [12] William A Wheeler, Lucas K Wagner, and Taylor L Hughes. Many-body electric multipole operators in extended systems. *Physical Review B*, 100(24):245135, 2019.
- [13] Chang-An Li, Bo Fu, Zi-Ang Hu, Jian Li, and Shun-Qing Shen. Topological phase transitions in disordered electric quadrupole insulators. *Physical Review Letters*, 125(16):166801, 2020.