



Aislantes Topológicos (ANEXOS)

Trabajo de Fin de Grado

Autor

Víctor Barceló Rubio

Director

Dr. Manuel Asorey Caballeira

FACULTAD DE CIENCIAS
2018

Índice

A. Hamiltoniano de Bloch de dos bandas	1
B. Singularidades en el Hamiltoniano de Bloch	2
C. Conexión y la curvatura de Berry en el sistema de dos bandas	2
D. Vectores de Bravais de la red hexagonal (Modelo de Haldane)	7
E. Pfaffiano de una matriz (antisimétrica)	8
F. Índice $\mathbb{Z}_2$ con simetría de inversión espacial	8
G. Estados de Borde del modelo de Haldane	9

A. Hamiltoniano de Bloch de dos bandas

El Hamiltoniano de Dirac para un sistema de dos bandas de energía es

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

Los autovalores $\lambda_{\pm}$ del Hamiltoniano se encuentran fácilmente resolviendo la ecuación característica $|\det(H(\mathbf{k}) - \lambda\mathbb{I})| = 0$:

$$\lambda_{\pm} = d_0(\mathbf{k}) \pm |\vec{d}(\mathbf{k})| = d_0 \pm (d_1^2(\mathbf{k}) + d_2^2(\mathbf{k}) + d_3^2(\mathbf{k}))^{1/2} = d_0 \pm d(\mathbf{k})$$

Los autoestados se encuentran también fácilmente a partir de $(H(\mathbf{k}) - \lambda\mathbb{I})|\psi\rangle = 0$. Si ponemos $|\psi\rangle = (A, B)$ y sustituimos, para el autovalor λ_- tenemos el sistema de ecuaciones, omitiendo la dependencia en $\mathbf{k}$

$$\begin{aligned} (d_0 + d_3 - \lambda_-)A + (d_1 - id_2)B &= 0 \\ (d_1 + id_2)A + (d_0 - d_3 - \lambda_-)B &= 0 \end{aligned}$$

Viendo la primera ecuación, hacemos $B = (d_1 + id_2)$, de este modo

$$(d_0 + d_3 - \lambda_-)A + (d_1 - id_2)(d_1 + id_2) = (d_3 + d)A + d_1^2 + d_2^2 = 0,$$

donde hemos sustituido λ_- . Despejamos A

$$A = -\frac{d_1^2 + d_2^2}{d_3 + d} = -\frac{d^2 - d_3^2}{d_3 + d} = \frac{(d_3 - d)(d_3 + d)}{d_3 + d} = d_3 - d$$

Por tanto el autoestado asociado al autovalor λ_- es

$$|\psi\rangle_- = \begin{pmatrix} d_3 - d \\ d_1 + id_2 \end{pmatrix}$$

Tenemos que normalizarlo. Calculamos $|\psi_-| = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$:

$$\begin{aligned} \langle\psi|\psi\rangle &= (d_3 - d, d_1 - id_2) \begin{pmatrix} d_3 - d \\ d_1 + id_2 \end{pmatrix} = (d_3 - d)^2 + d_1^2 + d_2^2 \\ &= d^2 + d_3^2 - 2d_3d + d_1^2 + d_2^2 = 2d^2 - 2d_3d = 2d(d - d_3) \end{aligned}$$

El vector normalizado queda

$$|\psi\rangle_- = \frac{1}{\sqrt{2d(d - d_3)}} \begin{pmatrix} d_3 - d \\ d_1 + id_2 \end{pmatrix}$$

Siguiendo el mismo procedimiento, obtenemos también el autoestado asociado al otro autovalor

$$|\psi\rangle_+ = \frac{1}{\sqrt{2d(d + d_3)}} \begin{pmatrix} d_3 + d \\ d_1 + id_2 \end{pmatrix}$$

B. Singularidades en el Hamiltoniano de Bloch

Para observar las singularidades que aparecen en los autoestados (2.3) del Hamiltoniano (2.2) y calculados en el anexo A, realizamos el cambio $d_1 + id_2 = te^{i\theta}$

$$|\psi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{(d_3 \pm |d_3| \sqrt{1 + (t/d_3)^2})^2 + t^2}} \begin{pmatrix} d_3 \pm d \\ te^{i\theta} \end{pmatrix}, \quad (\text{B.1})$$

que en el límite $t \rightarrow 0$ nos permite hacer uso de $\sqrt{1 + (t/d_3)^2} \simeq 1 + t^2/2d_3^2$, y queda

$$|\psi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{t^2 + |d_3|^2 (d_3/|d_3| \pm (1 + t^2/2d_3^2))^2}} \begin{pmatrix} |d_3| (d_3/|d_3| \pm (1 + t^2/2d_3^2)) \\ te^{i\theta} \end{pmatrix}, \quad (\text{B.2})$$

donde se ve claramente la dependencia de los autoestados con el signo de $d_3(k)$, ya que $d_3/|d_3| = \text{sign}(d_3)$, quedando en el límite $t \rightarrow 0$ los autoestados como en (2.4).

Singularidades en el modelo de Kane Mele

El sistema considerado en el Hamiltoniano de dos bandas es análogo al del modelo de Kane y Mele en el subespacio de spin $+1/2$. Por tanto, las singularidades en los vectores propios de ese modelo se obtienen de manera análoga a las que hemos obtenido.

Singularidades en el modelo de Bernevig-Hughes-Zahng

Se procede de manera análoga al de Kane-Mele, con la única diferencia de que hacemos cero las funciones d_2 y d_3 y que los autovectores son ligeramente distintos debido a la definición de las matrices γ del Hamiltoniano.

C. Conexión y la curvatura de Berry en el sistema de dos bandas

Para un sistema de dos bandas genérico, la conexión y curvatura de Berry pueden expresarse como

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

donde $d = +\sqrt{d_1^2 + d_2^2 + d_3^2}$.

Demostración de A_i

La conexión de Berry es $i\langle\psi|\partial_i|\psi\rangle$. Hallamos primero $\langle\psi|$ y $\partial_i|\psi\rangle$, para luego realizar el producto escalar. Derivaremos la expresión para la banda de valencia. El primero es inmediato

$$\langle\psi| = \frac{1}{\sqrt{2d(d - d_3)}} (d_3 - d, d_1 - id_2)$$

Para hallar $\partial_i|\psi\rangle$, derivamos las componentes

$$\begin{aligned}
\bullet \quad \partial_i \left(\frac{d_3 - d}{\sqrt{2d(d-d_3)}} \right) &= \frac{\partial_i(d_3 - d)\sqrt{2d(d-d_3)} - (d_3 - d)\partial_i\sqrt{2d(d-d_3)}}{2d(d-d_3)} = \\
&= \frac{\partial_i(d_3 - d)\sqrt{2d(d-d_3)} - (d_3 - d) \left[\frac{\partial_i d(d-d_3) + d\partial_i(d-d_3)}{\sqrt{2d(d-d_3)}} \right]}{2d(d-d_3)} = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2d(d-d_3)}} \left[\partial_i d_3 - \partial_i d + \frac{d\partial_i d - d_3\partial_i d + d\partial_i d - d\partial_i d_3}{2d} \right] = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2d(d-d_3)}} \left[\partial_i d_3 - \partial_i d + \frac{\partial_i d}{2} - \frac{d_3\partial_i d}{2d} + \frac{\partial_i d_3}{2} - \frac{\partial_i d}{2} \right] = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2d(d-d_3)}} \left[\partial_i d_3 - \partial_i d + \partial_i d - \frac{d_3\partial_i d}{2d} - \frac{\partial_i d_3}{2} \right] = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2d(d-d_3)}} \left[\frac{\partial_i d_3}{2} - \frac{d_3\partial_i d}{2d} \right] \\
\\
\bullet \quad \partial_i \left(\frac{d_1 + id_2}{\sqrt{2d(d-d_3)}} \right) &= \frac{\partial_i(d_1 + id_2)\sqrt{2d(d-d_3)} - (d_1 + id_2)\partial_i\sqrt{2d(d-d_3)}}{2d(d-d_3)} = \\
&= \frac{\partial_i(d_1 + id_2)\sqrt{2d(d-d_3)} - (d_1 + id_2) \left[\frac{\partial_i d(d-d_3) + d\partial_i(d-d_3)}{\sqrt{2d(d-d_3)}} \right]}{2d(d-d_3)} = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2d(d-d_3)}} \left[\partial_i d_1 + i\partial_i d_2 - \frac{(d_1 + id_2)(d\partial_i d - d_3\partial_i d + d\partial_i d - d\partial_i d_3)}{2d(d-d_3)} \right] = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2d(d-d_3)}} \left[\partial_i d_1 + i\partial_i d_2 - (d_1 + id_2) \left(\frac{\partial_i d}{2} - \frac{d\partial_i d}{2d(d-d_3)} + \frac{d\partial_i d_3}{2d(d-d_3)} \right) \right]
\end{aligned}$$

Para realizar el producto escalar, primero realizamos el producto de las componentes de los resultados obtenidos

$$\begin{aligned}
\bullet \quad \frac{1}{\sqrt{2d(d-d_3)}}(d_3 - d)\partial_i \left(\frac{d_3 - d}{\sqrt{2d(d-d_3)}} \right) &= \frac{1}{2d(d-d_3)}(d_3 - d) \left[\frac{\partial_i d_3}{2} - \frac{d_3\partial_i d}{2d} \right] = \\
&= \frac{1}{2d(d-d_3)} \left[\frac{d_3\partial_i d_3}{2} - \frac{d_3^2\partial_i d}{2d} - \frac{d\partial_i d_3}{2} + \frac{d_3\partial_i d}{2} \right] \\
\\
\bullet \quad \frac{1}{\sqrt{2d(d-d_3)}}(d_1 + id_2)\partial_i \left(\frac{d_1 + id_2}{\sqrt{2d(d-d_3)}} \right) &= \\
&= \frac{1}{2d(d-d_3)}(d_1 + id_2) \left[\partial_i d_1 + i\partial_i d_2 - \frac{(d_1 + id_2)(d\partial_i d - d_3\partial_i d + d\partial_i d - d\partial_i d_3)}{2d(d-d_3)} \right] = \\
&= \frac{1}{2d(d-d_3)}(d_1 + id_2) \left[\partial_i d_1 + i\partial_i d_2 - \frac{d_1\partial_i d}{2} + \frac{d_1 d\partial_i d}{2d(d-d_3)} - \frac{d_1 d\partial_i d_3}{2d(d-d_3)} - \frac{id_2\partial_i d}{2} + \frac{id_2 d\partial_i d}{2d(d-d_3)} - \frac{id_2 d\partial_i d_3}{2d(d-d_3)} \right] = \\
&= \frac{1}{2d(d-d_3)} \left[d_1\partial_i d_1 + id_1\partial_i d_2 - \frac{d_1^2\partial_i d}{2} + \frac{d_1^2 d\partial_i d}{2d(d-d_3)} - \frac{d_1^2 d\partial_i d_3}{2d(d-d_3)} - \frac{id_1 d_2\partial_i d}{2} + \frac{id_1 d_2 d\partial_i d}{2d(d-d_3)} - \frac{id_1 d_2 d\partial_i d_3}{2d(d-d_3)} - \right. \\
&\quad \left. - id_2\partial_i d_1 + d_2\partial_i d_2 + \frac{id_2 d_1\partial_i d}{2} - \frac{id_2 d_1 d\partial_i d}{2d(d-d_3)} + \frac{id_2 d_1 d\partial_i d_3}{2d(d-d_3)} - \frac{d_2^2\partial_i d}{2} + \frac{d_2^2 d\partial_i d}{2d(d-d_3)} - \frac{d_2^2 d\partial_i d_3}{2d(d-d_3)} \right] = \\
&= \frac{1}{2d(d-d_3)} \left[d_1\partial_i d_1 + d_2\partial_i d_2 + i(d_1\partial_i d_2 - d_2\partial_i d_1) - \frac{(d_1^2 + d_2^2)\partial_i d}{2d} - \frac{(d_1^2 + d_2^2)d\partial_i d}{2d(d-d_3)} - \frac{(d_1^2 + d_2^2)d\partial_i d_3}{2d(d-d_3)} \right]
\end{aligned}$$

Ahora solo queda sumarlos

$$\langle \psi | \partial_i | \psi \rangle = \frac{1}{2d(d-d_3)} \left[d_1 \partial_i d_1 + d_2 \partial_i d_2 + i(d_1 \partial_i d_2 - d_2 \partial_i d_1) - \frac{d_3 \partial_i d_3}{2} - \frac{d_3^2 \partial_i d}{2d} - \frac{d \partial_i d_3}{2} + \right. \\ \left. \frac{d_3 \partial_i d}{2} + \frac{(d_1^2 + d_2^2) \partial_i d}{2d} - \frac{(d_1^2 + d_2^2) d \partial_i d}{2d(d-d_3)} - \frac{(d_1^2 + d_2^2) d \partial_i d_3}{2d(d-d_3)} \right]$$

Usando $d_1^2 + d_2^2 = d^2 - d_3^2$ y desarrollando las diferencias de cuadrados se nos simplifica bastante

$$= \frac{1}{2d(d-d_3)} \left[d_1 \partial_i d_1 + d_2 \partial_i d_2 + i(d_1 \partial_i d_2 - d_2 \partial_i d_1) - \frac{d_3 \partial_i d_3}{2} - \frac{d_3^2 \partial_i d}{2d} - \frac{d \partial_i d_3}{2} + \right. \\ \left. + \frac{d_3 \partial_i d}{2} - \frac{(d^2 - d_3^2) \partial_i d}{2d} - \frac{(d^2 - d_3^2) d \partial_i d}{2d(d-d_3)} + \frac{(d^2 - d_3^2) d \partial_i d_3}{2d(d-d_3)} \right] = \\ = \frac{1}{2d(d-d_3)} \left[d_1 \partial_i d_1 + d_2 \partial_i d_2 + i(d_1 \partial_i d_2 - d_2 \partial_i d_1) - \frac{d_3 \partial_i d_3}{2} - \frac{d \partial_i d_3}{2} + \frac{d_3 \partial_i d}{2} - \right. \\ \left. - \frac{d \partial_i d}{2} - \frac{(d-d_3)(d+d_3) d \partial_i d}{2d(d-d_3)} + \frac{(d-d_3)(d+d_3) d \partial_i d_3}{2d(d-d_3)} \right] = \\ = \frac{1}{2d(d-d_3)} \left[d_1 \partial_i d_1 + d_2 \partial_i d_2 + i(d_1 \partial_i d_2 - d_2 \partial_i d_1) - \frac{d_3 \partial_i d_3}{2} - \frac{d \partial_i d_3}{2} + \frac{d_3 \partial_i d}{2} - \right. \\ \left. - \frac{d \partial_i d}{2} - \frac{(d+d_3) \partial_i d}{2} + \frac{(d+d_3) \partial_i d_3}{2} \right]$$

Teniendo en cuenta que $\partial_i d = (d_1 \partial_i d_1 + d_2 \partial_i d_2 + d_3 \partial_i d_3)/d$, nos queda

$$\frac{1}{2d(d-d_3)} \left[d_1 \partial_i d_1 + d_2 \partial_i d_2 + i(d_1 \partial_i d_2 - d_2 \partial_i d_1) - \frac{d_3 \partial_i d_3}{2} - \frac{d \partial_i d_3}{2} + \frac{d_3 \partial_i d}{2} + \right. \\ \left. - \frac{d_1 \partial_i d_1}{2} - \frac{d_2 \partial_i d_2}{2} - \frac{d_3 \partial_i d_3}{2} - \frac{d \partial_i d}{2} - \frac{d_3 \partial_i d}{2} + \frac{d \partial_i d_3}{2} + \frac{d_3 \partial_i d_3}{2} \right] = \\ = \frac{1}{2d(d-d_3)} \left[d_1 \partial_i d_1 + d_2 \partial_i d_2 + i(d_1 \partial_i d_2 - d_2 \partial_i d_1) - \frac{d_1 \partial_i d_1}{2} - \frac{d_2 \partial_i d_2}{2} + \frac{d_3 \partial_i d_3}{2} - \frac{d \partial_i d}{2} - \frac{d_3 \partial_i d}{2} \right] = \\ = \frac{1}{2d(d-d_3)} \left[\frac{d_1 \partial_i d_1}{2} + \frac{d_2 \partial_i d_2}{2} + i(d_1 \partial_i d_2 - d_2 \partial_i d_1) + \frac{d_3 \partial_i d_3}{2} - \frac{d \partial_i d}{2} \right] = \\ = \frac{1}{2d(d-d_3)} \left[\frac{d \partial_i d}{2} + i(d_1 \partial_i d_2 - d_2 \partial_i d_1) - \frac{d \partial_i d}{2} \right] \\ = \frac{1}{2d(d-d_3)} i(d_1 \partial_i d_2 - d_2 \partial_i d_1)$$

Por tanto, la expresión para la componente i de la conexión de Berry en un sistema de dos bandas, para la banda de valencia, es

$$A_i^- = i\langle\psi_-|\partial_i|\psi_- \rangle = \frac{-1}{2d(d-d_3)}(d_1\partial_id_2 - d_2\partial_id_1)$$

Realizando el mismo procedimiento con el autoestado de conducción, obtenemos

$$A_i^+ = i\langle\psi_+|\partial_i|\psi_+ \rangle = \frac{-1}{2d(d+d_3)}(d_1\partial_id_2 - d_2\partial_id_1)$$

Demostración de F_{ij}

La curvatura de Berry se define como $F = dA$, siendo d la derivada exterior y A la conexión de Berry. Como A es una 1-forma, F será una 2-forma y por tanto sus componentes pueden expresarse como

$$F_{ij} = \partial_i A_j - \partial_j A_i$$

Para derivar F_{ij} usaremos la expresión que hemos obtenido para la conexión de Berry. Haciendo $\partial_j A_i$, se obtiene

$$\partial_j A_i = \frac{(-\partial_j d_1 \partial_i d_2 - d_1 \partial_j \partial_i d_2 + \partial_j d_2 \partial_i d_1 + d_2 \partial_j \partial_i d_1)(d^2 - dd_3) + (d_1 \partial_i d_2 - d_2 \partial_i d_1)(2d \partial_j d - d \partial_i d_3 - d_3 \partial_j d)}{2d^2(d-d_3)^2}$$

Para $\partial_i A_j$ basta con intercambiar los índices $i \leftrightarrow j$. Como hemos hecho la derivada $\partial_j A_i$, vamos a obtener la expresión para F_{ji} , y la antisimetría de este tensor nos dará $F_{ij} = -F_{ji}$. La igualdad de las derivadas cruzadas va a hacer que se cancelen al realizar la resta. El primer sumando de cada numerador va con el signo cambiado, y al restar, se suman

$$F_{ji} = \frac{2(d^2 - dd_3)(-\partial_j d_1 \partial_i d_2 + \partial_j d_2 \partial_i d_1) + (d_1 \partial_i d_2 - d_2 \partial_i d_1)(2d \partial_j d - d \partial_i d_3 - d_3 \partial_j d)}{2d^2(d-d_3)^2} - \frac{(d_1 \partial_j d_2 - d_2 \partial_j d_1)(2d \partial_i d - d \partial_i d_3 - d_3 \partial_i d)}{2d^2(d-d_3)^2}$$

Desarrollamos, sacando factor común la constante de normalización

$$\begin{aligned} F_{ji} &= \frac{1}{2d^2(d-d_3)^2} \left[2d^2(1-d_3/d)(-\partial_j d_1 \partial_i d_2 + \partial_j d_2 \partial_i d_1) - d(d_1 \partial_i d_2 \partial_j d_3 - d_2 \partial_i d_1 \partial_j d_3) + \right. \\ &\quad \left. + (d_1 \partial_i d_2 - d_2 \partial_i d_1)(2d-d_3) \partial_j d + d(d_1 \partial_j d_2 \partial_i d_3 - d_2 \partial_j d_1 \partial_i d_3) - (d_1 \partial_j d_2 - d_2 \partial_j d_1)(2d-d_3) \partial_i d \right] = \\ &= \frac{1}{2d^2(d-d_3)^2} \left[2d^2(1-d_3/d)(-\partial_j d_1 \partial_i d_2 + \partial_j d_2 \partial_i d_1) - \frac{d^2(d_1 \partial_i d_2 \partial_j d_3 - d_2 \partial_i d_1 \partial_j d_3)}{d} + \right. \\ &\quad \left. + (d_1 \partial_i d_2 - d_2 \partial_i d_1)(2d-d_3) \partial_j d + \frac{d^2(d_1 \partial_j d_2 \partial_i d_3 - d_2 \partial_j d_1 \partial_i d_3)}{d} - (d_1 \partial_j d_2 - d_2 \partial_j d_1)(2d-d_3) \partial_i d \right] = \\ &= \frac{1}{2d^2(d-d_3)^2} \left[2d^2(1-d_3/d)(-\partial_j d_1 \partial_i d_2 + \partial_j d_2 \partial_i d_1) - \frac{d^2(d_1 \partial_i d_2 \partial_j d_3 - d_1 \partial_i d_3 \partial_j d_2)}{d} + \right. \\ &\quad \left. + (d_1 \partial_i d_2 - d_2 \partial_i d_1)(2d-d_3) \partial_j d - \frac{d^2(d_2 \partial_i d_2 \partial_j d_3 - d_2 \partial_i d_1 \partial_j d_3)}{d} - (d_1 \partial_j d_2 - d_2 \partial_j d_1)(2d-d_3) \partial_i d \right] \end{aligned}$$

Introducimos las expresiones A , B y C tal que

$$\begin{aligned}
A &\equiv \frac{(d_1 \partial_i d_2 \partial_j d_3 - d_1 \partial_i d_3 \partial_j d_2)}{d} \\
B &\equiv \frac{(d_2 \partial_i d_3 \partial_j d_1 - d_2 \partial_i d_1 \partial_j d_3)}{d} \\
C &\equiv \frac{(d_3 \partial_i d_1 \partial_j d_2 - d_3 \partial_i d_2 \partial_j d_1)}{d},
\end{aligned}$$

y cuya suma puede expresarse como

$$A + B + C = \frac{1}{d} \epsilon_{abc} d_a \partial_i d_b \partial_j d_c,$$

donde se usa el convenio de sumación de Einstein. Desarrollamos, teniendo en cuenta $d_1^2 + d_2^2 = d^2 - d_3^2$ y que $\partial d = (1/d)(d_1 \partial d_1 + d_2 \partial d_2 + d_3 \partial d_3)$

$$\begin{aligned}
F_{ji} &= \frac{1}{2d^2(d-d_3)^2} \left[2d^2(1-d_3/d)(-\partial_j d_1 \partial_i d_2 + \partial_j d_2 \partial_i d_1) - d^2 A - d^2 B + \right. \\
&\quad \left. + (d_1 \partial_i d_2 - d_2 \partial_i d_1)(2d - d_3) \partial_j d - (d_1 \partial_j d_2 - d_2 \partial_j d_1)(2d - d_3) \partial_i d \right] = \\
&= \frac{1}{2d^2(d-d_3)^2} \left[2d^2(1-d_3/d)(-\partial_j d_1 \partial_i d_2 + \partial_j d_2 \partial_i d_1) - d^2 A - d^2 B + \right. \\
&\quad \left. + (d_1 \partial_i d_2 - d_2 \partial_i d_1)(2d - d_3) \frac{(d_1 \partial_j d_1 + d_2 \partial_j d_2 + d_3 \partial_j d_3)}{d} - \right. \\
&\quad \left. - (d_1 \partial_j d_2 - d_2 \partial_j d_1)(2d - d_3) \frac{(d_1 \partial_i d_1 + d_2 \partial_i d_2 + d_3 \partial_i d_3)}{d} \right] = \\
&= \frac{1}{2d^2(d-d_3)^2} \left[2d^2(\partial_i d_1 \partial_j d_2 - \partial_i d_2 \partial_j d_1) - 2d^2 C - d^2 A - d^2 B + \right. \\
&\quad \left. + \frac{(2d-d_3)}{d} (d_1^2(\partial_i d_2 \partial_j d_1 - \partial_i d_1 \partial_j d_2) + d_2^2(\partial_i d_2 \partial_j d_1 - \partial_i d_1 \partial_j d_2) + \right. \\
&\quad \left. + d_3(d_1 \partial_i d_2 \partial_j d_3 - d_2 \partial_i d_1 \partial_j d_3 - d_1 \partial_j d_2 \partial_i d_3 + d_2 \partial_j d_1 \partial_i d_3)) \right] \\
&= \frac{1}{2d^2(d-d_3)^2} \left[2d^2(\partial_i d_1 \partial_j d_2 - \partial_i d_2 \partial_j d_1) - 2d^2 C - d^2 A - d^2 B + \right. \\
&\quad \left. + \frac{(2d-d_3)}{d} ((d_1^2 + d_2^2)(\partial_i d_2 \partial_j d_1 - \partial_i d_1 \partial_j d_2) + \right. \\
&\quad \left. + d_3(d_1 \partial_i d_2 \partial_j d_3 - d_1 \partial_j d_2 \partial_i d_3) + d_3(d_2 \partial_j d_1 \partial_i d_3 - d_2 \partial_i d_1 \partial_j d_3)) \right] \\
&= \frac{1}{2d^2(d-d_3)^2} \left[2d^2 C \frac{d}{d_3} - 2d^2 C - d^2 A - d^2 B - 2(d^2 - d_3^2) \frac{d}{d_3} C + \right. \\
&\quad \left. + (d^2 - d_3^2) C + 2dd_3 A - d_3^2 A + 2dd_3 B - d_3^2 B \right] \\
&= \frac{1}{2d^2(d-d_3)^2} \left[(-d^2 - d_3^2 + 2dd_3) A - (d^2 + d_3^2 - 2dd_3) B + (-2d^2 + (2d_3 d + (d^2 - d_3^2))) C \right] \\
&= \frac{1}{2d^2(d-d_3)^2} \left[-(d^2 - d_3^2)^2 A - (d^2 - d_3^2)^2 B + (-2d^2 + (2d_3 d + (d^2 - d_3^2))) C \right] \\
&= \frac{1}{2d^2(d-d_3)^2} \left[-(d^2 - d_3^2)^2 A - (d^2 - d_3^2)^2 B - (d^2 - d_3^2)^2 C \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{-(d^2 - d_3^2)^2}{2d^2(d - d_3)^2} \left[A + B + C \right] \\
&= \frac{-1}{2d^2} \left[A + B + C \right] \\
&= \frac{-1}{2d^2} \left[\frac{1}{d} \epsilon_{abc} d_a \partial_i d_b \partial_j d_c \right] \\
&= \frac{-1}{2d^3} \epsilon_{abc} d_a \partial_i d_b \partial_j d_c,
\end{aligned}$$

lo cual, teniendo en cuenta la antisimetría de F_{ij} , nos da

$$F_{ij} = \frac{1}{2d^3} \epsilon_{abc} d_a \partial_i d_b \partial_j d_c,$$

que es la misma para ambas bandas.

D. Vectores de Bravais de la red hexagonal (Modelo de Haldane)

En la red hexagonal del modelo de Haldane, los primeros y segundos vecinos están representados por los vectores de la figura, generando $\{a_1, a_2, a_3\}$ y $\{b_1, b_2, b_3\}$ las respectivas subredes.

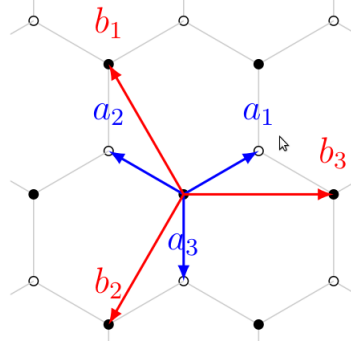


Figura D.1: Vectores en la red hexagonal para el modelo de Haldane. (Figura de ref. [?])

Los vectores a primeros vecinos son, en la orientación de la figura, son

$$a_1 = \begin{pmatrix} \sqrt{3}/2 \\ 1/2 \end{pmatrix} \quad a_2 = \begin{pmatrix} -\sqrt{3}/2 \\ 1/2 \end{pmatrix} \quad a_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} = -(a_1 + a_2)$$

Y a segundos vecinos

$$b_1 = (a_2 - a_3) = \begin{pmatrix} -\sqrt{3}/2 \\ 3/2 \end{pmatrix} \quad b_2 = (a_3 - a_1) = \begin{pmatrix} -\sqrt{3}/2 \\ -3/2 \end{pmatrix} \quad b_3 = (a_1 - a_2) = \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 0 \end{pmatrix}$$

Como se aprecia, solo dos vectores de cada conjunto son linealmente independientes y por tanto bastaran para representar a cada subred. Nos interesan las interacciones a segundos vecinos, que son las que rompen la simetría en el modelo de Haldane. Como base de esa subred cogeremos b_1 y b_2 . El espacio recíproco tiene la misma dimensión que el real y cumple

$$b_i b_j^* = 2\pi \delta_{ij}$$

Así definidos, la base de vectores de la red reciproca es

$$b_1^* = 2\pi \begin{pmatrix} -1/\sqrt{3} \\ 1/3 \end{pmatrix} \quad b_2^* = 2\pi \begin{pmatrix} -1/\sqrt{3} \\ -1/3 \end{pmatrix}$$

E. Pfaffiano de una matriz (antisimétrica)

El Pfaffiano se define para matrices anti-simétricas como

$$\text{Pf}(A) = \frac{1}{2^n n!} \sum_{\sigma \in S_{2n}} \text{sign}(\sigma) \prod_{i=1}^n a_{\sigma(2i-1), \sigma(2i)}, \quad (\text{E.1})$$

siendo S_{2n} el grupo de permutaciones de n elementos y $\text{sign}(\sigma)$ la signatura de la permutación σ . Debido a su definición, solo existe para matrices cuadradas con un número par de columnas. Además cumple la propiedad

$$\text{Pf}(A)^2 = \det(A) \quad (\text{E.2})$$

F. Índice $\mathbb{Z}_2$ con simetría de inversión espacial

En caso de que un sistema invariante bajo T presente también simetría de inversión espacial $\mathcal{P}$, simplifica bastante su derivación. Es decir, se cumple

$$T \mathcal{P} H(\mathbf{k}) T^{-1} \mathcal{P}^{-1} = H(-\mathbf{k}) \quad \longleftrightarrow \quad [H, T \mathcal{P}] = 0 \quad (\text{F.1})$$

Dado que la curvatura de Berry es nula debido a las simetrías, podemos escoger un gauge para la conexión de Berry en el que ésta también se anule (gauge de Coulomb). Consideramos los elementos de matriz del operador $\mathcal{P} T$

$$v_{mn}(\mathbf{k}) = \langle u_{m,\mathbf{k}} | \mathcal{P} T | u_{n,\mathbf{k}} \rangle, \quad (\text{F.2})$$

donde los índices m y n corresponden a las $2N$ bandas de energía ocupadas. Los elementos de la diagonal son nulos por $T^2 = -1$ y por tanto la matriz $v(\mathbf{k})$ es antisimétrica. Además también es unitaria por $[H, T \mathcal{P}] = 0$. Por tanto, su Pfaffiano está definido y está relacionado con la conexión de Berry de la forma [8]

$$\mathbf{A}(\mathbf{k}) = \frac{i}{2} \text{Tr} \left[v(\mathbf{k})^\dagger \nabla_{\mathbf{k}} v(\mathbf{k}) \right] = i \nabla_{\mathbf{k}} \log \text{Pf} [v(\mathbf{k})], \quad (\text{F.3})$$

donde se ha usado la propiedad $\det[v] = \text{Pf}[v]^2$ y $\nabla_{\mathbf{k}} \log \det[v(\mathbf{k})] = \text{Tr} \nabla_{\mathbf{k}} \log v(\mathbf{k}) = \text{Tr} [v(\mathbf{k})^\dagger \nabla_{\mathbf{k}} v(\mathbf{k})]$. Para conseguir $\mathbf{A}(\mathbf{k}) = 0$ debemos ajustar las fases de autoestados para conseguir $\text{Pf}[v(\mathbf{k})] = 1$, que puede hacerse mediante una transformación de los autoestados de la base

$$|u_{n,\mathbf{k}}\rangle \longrightarrow \begin{cases} e^{i\theta_{\mathbf{k}}} |u_{n,\mathbf{k}}\rangle & \text{para } n = 1 \\ |u_{n,\mathbf{k}}\rangle & \text{para } n \neq 1 \end{cases} \quad \text{Pf}[v(\mathbf{k})] \longrightarrow \text{Pf}[v(\mathbf{k})] e^{i\theta_{\mathbf{k}}} \quad (\text{F.4})$$

Bajo esta transformación de la base, la matriz

$$w_{mn}(\mathbf{k}) = \langle u_{m,-\mathbf{k}} | T | u_{n,\mathbf{k}} \rangle, \quad (\text{F.5})$$

cumple $\det[w(\mathbf{k})] = 1$ para todo $\mathbf{k}$, teniendo en cuenta la propiedad $v(-\mathbf{k}) = w(\mathbf{k})v(\mathbf{k})^*w(\mathbf{k})^T$ y usando la identidad $\text{Pf}[XAX^T] = \text{Pf}[A]\det[X]$. Usando la propiedad $\mathcal{P}^2 = 1$ podemos escribir w_{ij} como

$$w_{mn}(\lambda_i) = \langle u_{m,-\lambda_i} | \mathcal{P}(\mathcal{P} T) | u_{n,\lambda_i} \rangle, \quad (\text{F.6})$$

donde la antilinealidad de T y las funciones de Bloch definidas como $|\psi_{n,\mathbf{k}}\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|u_{n,\mathbf{k}}\rangle$ permiten poner

$$w_{mn}(\lambda_i) = \langle \psi_{m,\lambda_i} | \mathcal{P}(\mathcal{P} T) | \psi_{n,\lambda_i} \rangle \quad (\text{F.7})$$

Como el operador $\mathcal{P}$ conmuta con el Hamiltoniano, el estado ψ_{n,λ_i} es también autoestado de $\mathcal{P}$, con autovalor $\xi(\lambda_i) = \pm 1$. Podemos escribir

$$w_{mn}(\lambda_i) = \xi_m(\lambda_i)v_{mn}(\lambda_i) \quad (\text{F.8})$$

El Pfaffiano será un polinomio en ξ_m

$$\text{Pf}[w]^2 = \det[w] = \det[v] \prod_{n=1}^{2N} \xi_m \quad (\text{F.9})$$

Debido a la degeneración de Kramer, cada estado $|u_{2m,\lambda_i}\rangle$ y $T|u_{2m,\lambda_i}\rangle$ comparte el mismo autovalor de paridad, y por tanto aparece dos veces en el producto anterior. Por tanto, tomando la raíz cuadrada

$$\text{Pf}[w] = \text{Pf}[v] \prod_{m=1}^N \xi_{2m}, \quad (\text{F.10})$$

donde el signo de la raíz cuadrada esta fijado por el caso especial donde todos los $\varepsilon_n = 1$, de modo que $w = v$. Como $\text{Pf}[v] = 1$, en el gauge que hemos escogido tenemos

$$\delta_i = \prod_{m=1}^N \xi_{2m}(\lambda_i), \quad (\text{F.11})$$

por tanto, a partir de los autovalores de la paridad en cada uno de los TRIM de la zona de Brillouin obtenemos el índice de Kane-Mele

$$(-1)^\nu = \prod_i \delta_i \quad (\text{F.12})$$

G. Estados de Borde del modelo de Haldane

El Hamiltoniano de Haldane en la aproximación de baja energía (5.7), con $\hbar v_F = 1$ y haciendo la sustitución $\mathbf{q} \rightarrow -i\nabla$ es

$$H_H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} m(y) & -i\partial_x - \partial_y \\ -i\partial_x + \partial_y & -m(y) \end{pmatrix} \quad (\text{G.1})$$

Puede obtenerse un sistema de ecuaciones diferenciales separable realizando una rotación de la base mediante la matriz unitaria

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad U = U^{-1}, \quad (\text{G.2})$$

con la que obtenemos

$$U H_H(\mathbf{k}) U^{-1} = \begin{pmatrix} -i\partial_x & \partial_y + m(y) \\ -\partial_y + m(y) & i\partial_x \end{pmatrix} \quad (\text{G.3})$$

Aplicando (G.3) a un estado $|\psi\rangle = (\alpha, \beta)$ genérico, la ecuación de Schrödinger $H_H |\psi\rangle = E|\psi\rangle$ nos da un sistema de ecuaciones tal que

$$\begin{aligned} (-i\partial_x - E)\alpha &= -(\partial_y + m(y))\beta = 0 \\ (i\partial_x - E)\beta &= -(-\partial_y + m(y))\alpha = 0 \end{aligned} \quad (\text{G.4})$$

Resolviendo por separado para α y β , la única solución que converge (tomando $m(y < 0) < 0$ y $m(y > 0) > 0$) es, en la base original

$$\psi_{q_x}(x, y) \propto e^{iq_x x} \exp \left[- \int_0^y m(y') dy' \right] \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{G.5})$$