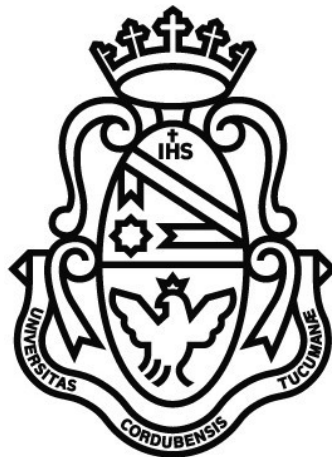


Efectos de la radiación en las propiedades eléctricas del grafeno

Estados topológicos de Floquet inducidos por láser

por
Pablo Matías Pérez Piskunow



Presentado ante la Facultad de Matemática, Astronomía y Física
como parte de los requerimientos para la obtención del grado de

Doctor en Física

de la
UNIVERSIDAD NACIONAL DE CÓRDOBA

Diciembre, 2015

©FaMAF – UNC 2015

Director: Dr. Luis E. F. Foà Torres

Co-Director: Dr. Gonzalo Usaj



Efectos de la radiación en las propiedades eléctricas del grafeno por Pablo M. Perez-Piskunow
se distribuye bajo una [Licencia Creative Commons Atribución 2.5 Argentina](https://creativecommons.org/licenses/by/2.5/argentina/) .

*un árbol quieto
crece hacia abajo
sin que lo veas*

AGRADECIMIENTOS

Quiero expresar mi mayor sentido de gratitud hacia aquellos que me acompañaron durante el desarrollo de este doctorado ya que gracias a ellos he podido disfrutar de todas las etapas de esta experiencia. Muchas gracias a Luis Foà Torres y Gonzalo Usaj, mis mentores académicos, quienes impulsaron con más fuerza los logros de este trabajo de investigación, y también a Carlos Balseiro, Horacio Pastawski, Stephan Roche y Hernán Calvo, con quienes tuve la suerte de poder colaborar y aprender de ellos. Además quiero agradecer la Universidad Nacional de Córdoba, CONICET y la Facultad de Matemática, Astronomía y Física, y sus autoridades por haber brindado el marco institucional para poder desarrollar este trabajo de investigación. También quiero agradecer a los excelentes profesores que tuve junto al personal administrativo de la FaMAF y del Instituto de Física Enrique Gaviola.

Sin olvidar el aspecto personal, quiero agradecerles a los que están siempre presentes: mi mamá Eli y mi hermano Santi; a María, quien me acompañó día a día en estos últimos tiempos, los más difíciles; a los buenos amigos que pude conocer en el transcurso de la carrera y del doctorado: Elo, Fla, Naty, Vir, Agus, Anya; a muchos más con los que compartimos mates y charlas eternas después del almuerzo, Nir, Nacho, Flor, Andrés, Anita, Raque, Berna, Carla, Flor Orosz, Lucas, Pablo, Cande, Franco, Charly, Caro, Luisa; a los amigos de siempre que me aguantaron tanto, tanto tiempo: Franco, Tef, Lupe y Nati. Finalmente, a todos los que saben cuánto los aprecio y quiero.

RESUMEN

Palabras clave: grafeno, aislantes topológicos, teoría de Floquet, transporte electrónico, estados de borde.

Números PACS: 73.63.-b; 73.22.Pr; 73.20.At; 72.80.Vp; 78.67.-n

El grafeno es el material más delgado que existe y reúne muchas propiedades récord, incluyendo conductividad térmica y eléctrica, y resistencia mecánica. Desde su aislamiento y caracterización en 2004, ha comenzado una carrera de científicos en diversas áreas de la física, química, y la ciencia de materiales para entender y explotar las propiedades de este notable material.

Esta tesis está dedicada al estudio teórico del grafeno iluminado por láseres intensos. Usualmente los efectos de la luz sobre la materia son perturbativos. De hecho la luz se utiliza como una herramienta para observar diferentes aspectos de un material, como por ejemplo información estructural vía espectroscopia Raman. En esta tesis, sin embargo, nos enfocamos en efectos no perturbativos de la luz sobre el material. Mostramos cómo un láser puede modificar la estructura electrónica del grafeno, alterando sus propiedades de conducción, y generando también características topológicas ausentes en el material no iluminado.

En los dos primeros capítulos de esta tesis discutiremos las modificaciones en la estructura electrónica tanto de un plano de grafeno como de distintos tipos de nanocintas de grafeno. En ambos casos, vemos que la radiación abre brechas energéticas en las bandas de grafeno. Este efecto podría ser usado para aprovechar las notables propiedades de conducción del grafeno, a la vez que un láser sería el mecanismo de encendido y apagado de la corriente, abriendo posibilidades al diseño de nanodispositivos optoelectrónicos basados en grafeno.

En el tercer capítulo analizamos en detalle las brechas electrónicas inducidas por láser en una nanocinta de grafeno y veremos como, debido a la radiación, se forman estados localizados en los bordes de la nanocinta. Estos estados se propagan en direcciones opuestas en cada borde (son quirales), y debido a esta separación espacial de los estados disponibles, no hay retrodispersión y el transporte es robusto frente a defectos del material. Estos resultados junto con un cálculo del invariante topológico para el grafeno irradiado nos permite concluir que estos estados son topológicos, de manera que el grafeno irradiado constituye un aislante topológico de Floquet.

En el cuarto capítulo estudiamos la conductancia en una configuración de dos y seis terminales. Esta última configuración nos permite calcular la resistencia Hall, que podemos comparar con los estados disponibles en la relación de dispersión del grafeno irradiado. Vemos que la cuantización de la conductancia en los aislantes topológicos de Floquet no sigue las mismas reglas que en el efecto Hall cuántico entero, donde la conductancia está cuantizada en el número de estados quirales, que a su vez es equivalente al invariante topológico que caracteriza las bandas electrónicas del material. En cambio, la conductancia de los aislantes topológicos de Floquet está aproximadamente cuantizada en el número de canales activos para el transporte coherente, que son el número de estados que llevan un peso espectral significativo en la densidad de estados promediada en el tiempo. Los resultados obtenidos tienen como ejemplo un sistema basado en grafeno pero son fácilmente generalizables a cualquier sistema que albergue electrones de tipo Dirac.

El capítulo quinto contiene los últimos resultados de esta tesis, donde se caracterizan en profundidad las propiedades topológicas de un aislante topológico de Floquet a bajas frecuencias. El espectro de Floquet de un sistema de tipo Dirac descrito por el formalismo de Floquet, en particular el grafeno irradiado, se vuelve más complejo y difícil de analizar, debido a la multiplicidad de los procesos fotónicos de absorción/emisión disponibles. En este capítulo daremos un método para describir constructivamente la topología y el espectro de Floquet de bajas frecuencias, a medida que se consideran más procesos fotónicos. Develamos que existe una jerarquía de brechas energéticas anidadas una dentro de otra, y ordenadas por el número de procesos fotónicos involucrados en la apertura de la brecha. Además, el número de orden del proceso fotónico también se relaciona directamente con el número de estados topológicos de Floquet que ocurren dentro de cada brecha energética. Este método sirve para el régimen de bajas frecuencias, fuera de este rango debemos recurrir al cálculo explícito del invariante topológico que describe el número total de estados topológicos. Haciendo uso de este formalismo damos un mapa topológico, para un amplio rango de frecuencias e intensidades de radiación, proveyendo así un estudio detallado de la topología de los aislantes topológicos de Floquet en sistemas de tipo Dirac.

En el último capítulo se presentan las conclusiones, además de una discusión sobre el contexto en el que se desarrolla el trabajo de tesis.

ÍNDICE GENERAL

Resumen	VII
1. Introducción	1
1.1. Estructura electrónica del grafeno	2
1.1.1. Fermiones de Dirac	6
1.1.2. Tunelamiento de Klein	7
1.1.3. Interés para la física y aplicaciones tecnológicas	8
1.2. Aislantes topológicos	8
1.2.1. El nacimiento de los aislantes topológicos	8
1.3. Sistemas forzados periódicamente	9
1.4. Sobre esta tesis	10
2. Gaps en grafeno	11
2.1. Teoría de Floquet	12
2.1.1. El Hamiltoniano de Floquet	12
2.1.2. Hamiltoniano de Floquet en forma matricial	14
2.1.3. Réplicas de Floquet	15
2.1.4. Densidad de estados media	16
2.2. Efectos de la radiación en grafeno bulk	16
2.3. Efectos de la radiación en nanocintas	19
2.3.1. Nanocintas de grafeno	20
2.3.2. Cambios en la densidad de estados	21
2.4. Propiedades de transporte	25
2.5. Contribuciones originales	26
3. Estados topológicos de Floquet	29
3.1. Estados de borde	30
3.1.1. Primeras evidencias	30
3.2. Cálculos analíticos	31
3.2.1. Gaps y estados de grafeno bulk	32
3.2.2. Estados quirales en grafeno zigzag	34
3.3. Topología de las bandas de Floquet	42
3.3.1. Distintos tipos de borde	45
3.3.2. Robustez del transporte	46

3.4. Contribuciones originales	48
4. Transporte en aislantes topológicos de Floquet	49
4.1. Transporte a dos terminales	51
4.1.1. Mismatch de los modos electrónicos	53
4.2. Transporte multiterminal	54
4.2.1. Plateaus de conductancia Hall	57
4.3. Contribuciones originales	58
5. Jerarquía de los estados topológicos	61
5.1. Gaps del orden del número de procesos fotónicos	63
5.1.1. Invariantes topológicos de las bandas de Floquet	63
5.1.2. Múltiples procesos fotónicos en bajas frecuencias	67
5.2. Mapa de transiciones de fases topológicas	73
5.2.1. Frecuencias intermedias e intensidades altas	73
5.2.2. Transiciones al variar frecuencia e intensidad	73
5.3. Contribuciones originales	75
6. Conclusiones	77
6.1. Principales Contribuciones Originales	77
6.2. Perspectivas en el campo de esta tesis	79
6.2.1. Clasificación topológica de sistemas periódicos	79
6.2.2. El problema de la ocupación de los estados de Floquet	79
6.2.3. Realización experimental	80
6.3. Trabajos derivados de esta tesis	81
Apéndice A. Modelos para describir el grafeno irradiado	93
A.1. Modelo tight-binding para grafeno bulk irradiado	93
A.2. Modelo $k \cdot p$ para GNR's irradiadas	95
A.2.1. Nanocintas de grafeno armchair	96
A.2.2. Nanocintas de grafeno zigzag	100

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN

Contenidos

1.1. Estructura electrónica del grafeno	2
1.1.1. Fermiones de Dirac	6
1.1.2. Tunelamiento de Klein	7
1.1.3. Interés para la física y aplicaciones tecnológicas	8
1.2. Aislantes topológicos	8
1.2.1. El nacimiento de los aislantes topológicos	8
1.3. Sistemas forzados periódicamente	9
1.4. Sobre esta tesis	10

Abstract

En este primer capítulo introduciremos algunas de las ideas básicas para entender el contexto en el que se desarrolla esta tesis. El aislamiento del grafeno, junto con la caracterización de sus notables propiedades han abierto nuevas ramas de la física teórica tanto como experimental. Una de ellas ha cobrado gran importancia recientemente: los aislantes topológicos. Descubriremos cómo la estructura del grafeno ha sido utilizada como base de un primer modelo simplificado de aislantes topológicos. Mostraremos cómo el grafeno y los aislantes topológicos están fuertemente relacionados ya que la radiación de un láser nos permite hacer del grafeno un aislante topológico de Floquet donde las propiedades topológicas son inducidas y controladas por los parámetros del láser.

Esta tesis se desarrolla cerca de diez años después del descubrimiento del grafeno y siete años después de la realización experimental de un aislante topológico sin campo magnético. Desde entonces, la comunidad dedicada a la investigación del grafeno, sus propiedades y sus aplicaciones ha crecido enormemente dentro de la física.

Paralelamente, se han incrementado los esfuerzos para desarrollar nuevos aislantes topológicos en dos y tres dimensiones y se ha desarrollado la teoría del orden topológico, necesaria para entender estos nuevos estados electrónicos. Hoy en día, se utiliza esta teoría para explicar el orden topológico de superconductores, excitaciones acústicas, plasmónicas y fotónicas, entre otras.

La interacción de la luz con la materia une dos grandes áreas de la física: los sistemas de baja dimensionalidad como el grafeno y los aislantes topológicos, abriendo el camino para explorar las distintas propiedades que pueden ser inducidas externamente en un material. En esta tesis nos basamos en el estudio teórico de los efectos de la radiación láser sobre grafeno y explicamos las modificaciones que se producen en la estructura electrónica y el cambio no trivial en sus propiedades topológicas. El desarrollo de este trabajo se estructura en los siguientes objetivos:

- Entender la estructura electrónica del grafeno y las modificaciones que produce la radiación, utilizando el formalismo de Floquet.
- Obtener resultados físicos y predicciones observables, simulando mediciones de densidad de estados y obteniendo cálculos de transporte en una configuración de dos terminales.
- Contrastar la cuantización de la conductancia de un aislante topológico de Floquet respecto de un aislante topológico estático. Explicar esta cuantización mediante las características del espectro y de las funciones de onda involucradas.
- Caracterizar la topología de las bandas en el espectro de cuasienergías que se obtiene al someter al grafeno a un potencial periódico en el tiempo utilizando la teoría de Floquet.



Andre Geim también recibió el Premio Ig Nobel a los trabajos curiosos por hacer levitar una rana en el año 2000. Imagen tomada de «Of flying frogs and levitrons» Berry y Geim (1997) [3].

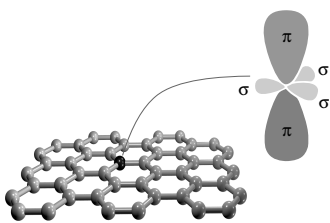


Fig. 1.1: Red hexagonal para el grafeno, con detalle de los orbitales atómicos hibridizados sp^2 en el plano xy , que forman los enlaces covalentes σ , mientras que los orbitales atómicos p_z forman los orbitales moleculares π , que son los que le dan las propiedades eléctricas al grafeno a bajas energías. Figura adaptada de [4].

1.1. Estructura electrónica del grafeno

El grafeno es uno de los materiales más simples que conocemos, sin embargo, su aislamiento y caracterización ha sido elusiva por mucho tiempo. Recién en el año 2004, el grafeno fue aislado y sus notables propiedades fueron caracterizadas por Andre Geim y Konstantin Novoselov [1, 2]. Sus avances les merecieron el Premio Nobel de Física en 2010 [“The Nobel Prize in Physics 2010”. Nobelprize.org. Nobel Media AB 2014. http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/2010].

Podría pensarse al grafeno como el material constituyente del grafito. Basta apilar muchas capas atómicas de grafeno hasta obtener un material bulk. De hecho, el proceso inverso fue usado para aislar en 2004 al grafeno. El *método de la cinta Scotch* consiste en «pelar» una muestra de grafito utilizando cinta adhesiva y decapar hasta obtener una capa de un átomo de espesor. Sin embargo, las propiedades del grafito y del grafeno son muy distintas, el grafito es blando (incluso usado como lubricante) y moderadamente conductor, mientras que el grafeno junto a los nanotubos de carbono constituyen los materiales más duros conocidos y de mayor conductividad eléctrica.

Este nuevo material de tan sólo un átomo de espesor hecho puramente de carbono tiene propiedades que desafían el sentido común (clásico). Es el material más duro conocido: su módulo de Young es incluso mayor que para el diamante; y su conductividad térmica y eléctrica son mayores que las del cobre.

Comenzamos abordando el primer objetivo de la tesis, describiendo la estructura electrónica del grafeno. Muchas de las peculiares propiedades de transporte en grafeno, tienen su origen en su estructura de bandas, que se conoce desde el año 1947, mucho antes que el grafeno mismo ya que fue analizada por Wallace como punto de partida para describir la estructura de bandas del grafito [5]. Esta descripción predice que el grafeno es un semi-metal o un semiconductor de gap cero, lo cual se puede deducir con un modelo muy simple. Como vemos en la Fig. 1.1, se trata de una red hexagonal, formada por átomos de carbono, cuyos orbitales están hibridizados en el tipo sp^2 en el plano xy , para formar orbitales σ sus tres vecinos, mientras que los orbitales atómicos p_z que forman enlaces π y dan las propiedades eléctricas y de transporte a bajas energías.

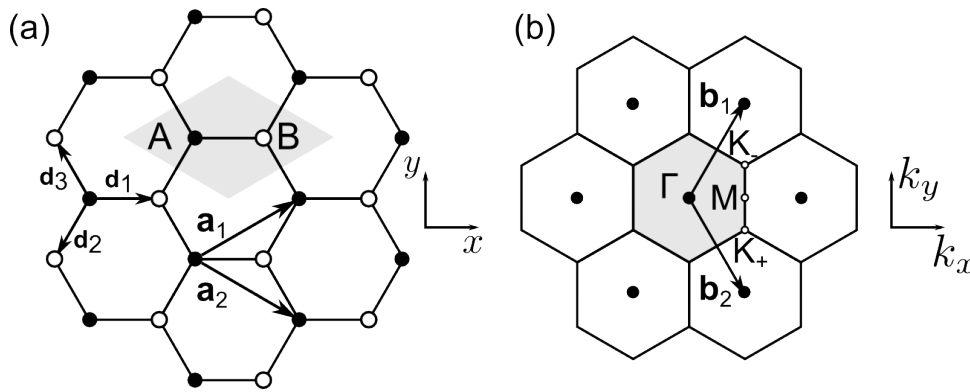


Fig. 1.2: (a) Red hexagonal de grafeno con sitios de tipo A y B denotados con círculos llenos y vacíos respectivamente. Los vectores $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2)$ son los vectores de red. (b) Red recíproca, expandida por los vectores $(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2)$. La primera zona de Brillouin (BZ) se muestra en gris. Los puntos K_+ y K_- se encuentran en vértices no equivalentes de la BZ. El punto M sobre la arista del hexágono, se encuentra entre medio de los puntos K_{\pm} y el punto Γ en el centro de la BZ. Figura adaptada de [4].

El modelo más simple considera orbitales p_z en una red hexagonal, donde sólo interaccionan con sus primeros tres vecinos [6], como se muestra en la Fig. 1.2 (a). La red hexagonal está formada por dos redes triangulares A y B , intercaladas, denotadas con círculos llenos y vacíos. Los vectores de red

$$\begin{aligned}\mathbf{a}_1 &= a(\sqrt{3}/2, 1/2) \\ \mathbf{a}_2 &= a(\sqrt{3}/2, -1/2),\end{aligned}$$

expanden la red triangular A , siendo $a = \sqrt{3}a_0$ la constante de red para grafeno y $a_0 = 0,142$ nm la distancia entre átomos de carbono. Cada sitio de la red B está desplazado en \mathbf{d}_i , $i = 1, 2, 3$, con

$$\begin{aligned}\mathbf{d}_1 &= a_0(1, 0) \\ \mathbf{d}_2 &= a_0(-1/2, -\sqrt{3}/2) \\ \mathbf{d}_3 &= a_0(1/2, \sqrt{3}/2),\end{aligned}$$

donde podemos verificar que $\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2 = (\mathbf{d}_1 - \mathbf{a}_1)$ y $\mathbf{d}_3 = (\mathbf{d}_1 - \mathbf{a}_2)$ conforman los vectores de desplazamiento hacia los tres primeros vecinos en la Fig. 1.2 (a). Los vectores \mathbf{d}_i conectan sitios de tipo A con sitios de tipo B , por lo que un sitio de tipo A tiene primeros vecinos sólo de tipo B .

En la Fig. 1.2 (b), observamos los vectores de la red recíproca \mathbf{b}_1 y \mathbf{b}_2 , que cumplen la relación $\mathbf{a}_1 \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$ y están dados por

$$\begin{aligned}\mathbf{b}_1 &= b(1/2, \sqrt{3}/2) \\ \mathbf{b}_2 &= b(1/2, -\sqrt{3}/2),\end{aligned}$$

donde $b = 4\pi/(\sqrt{3}a)$. La primera zona de Brillouin (BZ), construida como la celda de Wigner-Seitz de la red recíproca, toma forma hexagonal con seis vértices, de los cuales sólo dos son no equivalentes, mientras que los otros están desplazados en vectores de red recíproca. Estos puntos los denotamos con K_{\pm} , tales que

$$K_+ = 4\pi/3a(\sqrt{3}/2, -1/2) \quad K_- = 4\pi/3a(\sqrt{3}/2, 1/2),$$

y son de gran importancia para describir la relación de dispersión a bajas energías.

Para obtener la relación de dispersión describimos esta red con el modelo *tight-binding* utilizando el Hamiltoniano en segunda cuantización

$$\mathcal{H} = \sum_i \varepsilon_i \hat{c}_i \hat{c}_i^\dagger - \sum_{\langle i,j \rangle} t_{i,j} \hat{c}_i \hat{c}_j^\dagger + \text{h.c.},$$

donde h.c. denota el Hermitiano conjugado, ε_i es la energía del sitio i , la suma sobre $\langle i,j \rangle$ recorre los sitios i y sus primeros vecinos j y $t_{i,j}$ es el coste energético en que un electrón salte del sitio j al i , llamada amplitud de hopping.

En el caso de una red con invarianza traslacional, podemos aplicar el teorema de Bloch y obtenemos el Hamiltoniano de Bloch, cuyas autofunciones describen a las funciones de onda dentro de una celda unidad. En el caso en que los hoppings en cada dirección \mathbf{d}_i , con $i = 1, 2, 3$, sean homogéneos en toda la red y las energías de sitio de cada subred sean constantes, el Hamiltoniano de Bloch para grafeno toma la forma

$$\mathcal{H}_{\text{TB}}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \varepsilon_A & S(\mathbf{k}) \\ S(\mathbf{k})^* & \varepsilon_B \end{pmatrix}, \quad (1.1)$$

donde $S(\mathbf{k}) = \sum_{j=1}^3 t e^{i\mathbf{d}_j \cdot \mathbf{k}}$ es la suma de las fases que adquiere la onda de Bloch al desplazarse a sus vecinos y $S(\mathbf{k})^*$ su complejo conjugado. Fácilmente podemos diagonalizar este sistema y encontrar la relación de dispersión para el grafeno. Si suponemos que las energías de sitios A y B son idénticas, podemos tomarlas como la energía de referencia e igualarlas a cero. El espectro de energías del Hamiltoniano en la Ec. (1.1) con $\varepsilon_A = \varepsilon_B = 0$ se muestra en la Fig. 1.3 y está descrito por la relación de dispersión

$$\begin{aligned}\varepsilon(\mathbf{k})_{\pm} &= \pm |S(\mathbf{k})| \\ &= \pm t \sqrt{1 + 4 \cos \frac{\sqrt{3}k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} + 4 \cos^2 \frac{k_y a}{2}},\end{aligned}$$

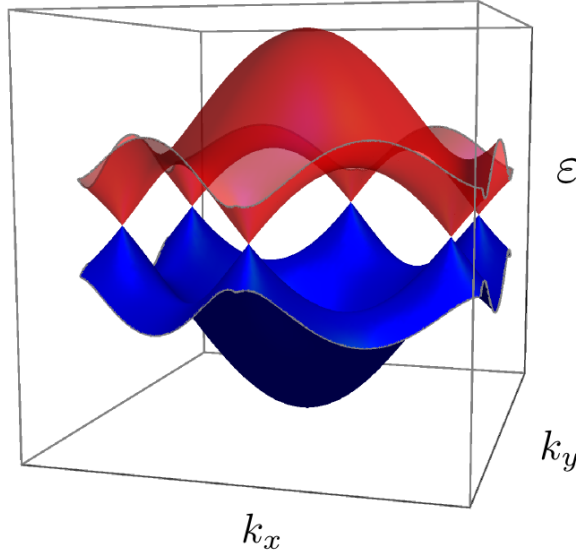


Fig. 1.3: Relación de dispersión para grafeno. La banda de valencia (azul) y la banda de conducción (rojo) se unen en dos puntos no equivalentes a energía cero, formando los *conos de Dirac*. Para bajas energías la relación de dispersión es lineal.

El espectro es simétrico respecto de $\varepsilon = 0$ y mientras no existan hoppings a segundos vecinos se preserva la simetría electrón-hueco: esto quiere decir que si existe un estado $\psi_+(\mathbf{k})$ con energía $\varepsilon(\mathbf{k})$, existe también un estado $\psi_-(\mathbf{k})$ con energía $-\varepsilon(\mathbf{k})$. En grafeno existen hoppings a segundos vecinos que rompen la simetría electrón-hueco, aunque en grafeno se preserva la simetría efectivamente para bajas energías.

La banda de conducción y de valencia se unen en los dos puntos K_{\pm} no equivalentes de la zona de Brillouin. Si \mathbf{k} es el vector de onda medido desde alguno de estos puntos, podemos expandir la relación de dispersión de la Ec. (1.1) para pequeños valores de \mathbf{k} y para el valle K_+ obtenemos

$$\mathcal{H}_{K_+}(\mathbf{k}) = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & k_- \\ k_+ & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.2)$$

donde $v_F = \sqrt{3}/2ta/\hbar$ es la velocidad de Fermi para grafeno, $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$. La expansión alrededor del punto K_- cumple $\mathcal{H}_{K_-} = \mathcal{H}_{K_+}^T$. El Hamiltoniano de la Ec. (1.2) puede ser expresado como

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{K_+}(\mathbf{k}) &= \hbar v_F (\sigma_x k_x + \sigma_y k_y) \\ &= \hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}, \end{aligned} \quad (1.3)$$

donde

$$\boldsymbol{\sigma} = \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \right) \quad (1.4)$$

son las matrices de Pauli y actúan sobre el grado de libertad de subred. En analogía con los sistemas donde $\boldsymbol{\sigma}$ es un operador que actúa sobre las variables de espín,

donde $\langle \sigma \rangle$ nos da la dirección del espín, llamamos al grado de libertad de subred el *pseudoespín*, y el valor de espetación $\langle \sigma \rangle$ nos da la dirección del pseudoespín

Podemos verificar que el Hamiltoniano es proporcional al operador de helicidad

$$h = \sigma \cdot \mathbf{k} / |\mathbf{k}|. \quad (1.5)$$

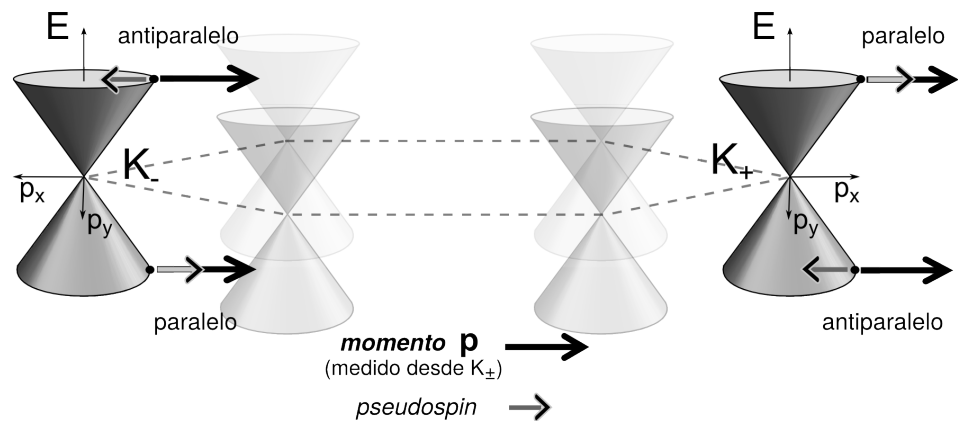
El operador h es la proyección del pseudoespín sobre la dirección del momento \mathbf{k} de la partícula. Inmediatamente notamos que el Hamiltoniano del sistema conmuta con el operador de helicidad, por lo que la proyección del pseudoespín sobre la dirección del vector \mathbf{k} es una cantidad bien definida y conservada. Dicho de otro modo, un estado con momento \mathbf{k} , que sea autoestado del Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, debe tener el pseudoespín bien definido, y en la dirección de \mathbf{k} , ya sea paralelo o antiparalelo.

El Hamiltoniano de la Ec. (1.2) es el Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ para grafeno, cuyo espectro

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \pm v_F |\mathbf{k}|$$

es lineal en \mathbf{k} , lo que da a la dispersión su forma cónica, característica de los fermiones de Dirac.

Fig. 1.4: Conos de Dirac a bajas energías. Sólo dos de los conos que aparecen en los vértices de la primera zona de Brillouin, son no equivalentes, llamados valles K_{\pm} . El pseudoespín en cada valle tiene dirección paralela o antiparalela al vector de onda \mathbf{k} y a la vez, se invierte según el estado electrónico pertenezca a la banda de valencia o a la banda de conducción. *Figura adaptada de [4].*



Se puede ver en la Fig. 1.4 esquemáticamente los conos de Dirac, ubicados en las seis esquinas de la zona de Brillouin. Se destacan los dos conos no equivalentes en los valles K_{\pm} . Los pseudoespines son paralelos (antiparalelos) a la dirección de propagación \mathbf{k} para un electrón en la banda de conducción del valle K_+ (K_-), mientras que en la banda de valencia la relación se invierte en ambos valles. Esta propiedad se la conoce como la *quiralidad* de los fermiones de Dirac, y tiene importantes consecuencias en las propiedades electrónicas y de transporte. Algunos de los efectos de los fermiones quirales son: (i) la ausencia de retrodispersión, (ii) el tunelamiento de Klein, (iii) particularidades en la antilocalización, entre otros.

1.1.1. Fermiones de Dirac

Una de las consecuencias más importantes de la relación de dispersión de bajas energías en grafeno, es la linealidad y quiralidad de las excitaciones electrónicas. A

este tipo de fermiones se los conoce como fermiones de Dirac. El término *fermiones de Dirac* ha sido usado en la descripción relativista de electrones libres y es tomado por la física de materia condensada para describir excitaciones electrónicas dentro de la red cristalina de semiconductores de gap pequeño (gap cero en grafeno). Las excitaciones de bajas energías en grafeno pueden ser descritas por una relación de dispersión relativista, expandida en dos puntos independientes de la zona de Brillouin y donde el espín es remplazado por el *espinor* que describe la fase relativa entre las subredes A y B . La interacción espín-órbita (SO) que puede modificar la estructura de bandas cerca de la energía de Fermi desdoblado los niveles energéticos para los distintos espines. En grafeno la interacción SO es despreciable en grafeno y los distintos espines tienen prácticamente la misma relación de dispersión, a menos que se incremente externamente el acople SO mediante un campo magnético o bien, mediante acoplamiento SO inducido por proximidad.

Las excitaciones electrónicas al interior del grafeno cumplen con las ecuaciones de Dirac y que se comportan como fermiones sin masa. Se propagan como los fotones, con una relación de dispersión lineal, es decir a velocidad constante. Esta velocidad está dada por los parámetros del material y se conoce como velocidad de Fermi $v_F = 10^6$ m/s, tan solo unas 300 veces más pequeña que la velocidad de la luz.

1.1.2. Tunelamiento de Klein

Uno de los efectos más interesantes en grafeno, también es consecuencia de los efectos relativistas que cumplen los fermiones sin masa: *La paradoja de Klein*. Este efecto hace que las excitaciones electrónicas en grafeno y los electrones quirales en general, tengan probabilidad 1 de atravesar una barrera electrostática, a diferencia de otros materiales. La propagación de los electrones quirales se ve poco afectada por la presencia de perturbaciones externas y desorden que pueden tratarse como potenciales electrostáticos localizados. El efecto de tunelamiento de Klein da transmisión perfecta para un electrón que incide en dirección normal de una barrera. Si la incidencia no es normal, la transmisión decrece con una función que depende de la altura de la barrera. Aún más paradójico resulta que una barrera suave es más efectiva en reflejar un electrón (cuando se propaga en una dirección arbitraria), mientras que una barrera más abrupta es más transparente. Incluso, si la barrera separa regiones de excitaciones de electrones y huecos, puede haber transmisión de electrón a hueco con una eficacia del 100% [7, 8, 9].

Cuando el electrón se desplaza en la dirección del vector de onda k el pseudoespín se conserva en ausencia de scattering entre distintos valles, por lo que la transmisión en incidencia normal a una barrera cuadrada, es perfecta. Como vimos en la Fig. 1.4, a una misma energía el pseudoespín tiene direcciones opuestas en el valle K_+ y K_- , de modo que si se conserva el pseudoespín y se desprecia el scattering entre distintos valles, el único estado accesible al otro lado de la barrera es el estado que se propaga en la misma dirección k . De esta forma se obtienen

caminos libres medios muy largos del orden del micrón, que presenta un desafío en cuanto a confinar los electrones en grafeno.

1.1.3. Interés para la física y aplicaciones tecnológicas

La familia de materiales bidimensionales, fundada con el descubrimiento del grafeno, continúa creciendo y siendo objeto de intensa investigación. Algunos de sus miembros son disulfuro de molibdeno (dicalcogenuros en general), fosforeno, nitruro de boro hexagonal, siliceno, entre otros.

La investigación y el financiamiento dedicados a estos nuevos materiales ya encuentran muchas aplicaciones, que varían desde interruptores ópticos hasta fotocorrientes bombeadas para la recolección de energía [10]. Las aplicaciones en optoelectrónica también son vastas: ejemplos de dispositivos plasmónicos se encuentran en las Refs. [11, 12, 13, 14] y de fotodetectores en [15, 16]. En particular en grafeno, los campos en las frecuencias de los terahertz producen efectos no lineales [17], pueden producir fotoconductividad [18] y guiar el diseño de fototransistores [19].

1.2. Aislantes topológicos

Los fermiones de Dirac son excitaciones electrónicas en las que el grado de espín está directamente relacionado con la dirección de propagación o con el vector de onda. Este tipo de excitaciones caracteriza los estados topológicos que aparecen en la superficie de los aislantes topológicos con simetría de reversión temporal. En esta sección estudiamos cómo los aislantes topológicos, los fermiones de Dirac y el grafeno se encuentran ligados desde su desarrollo teórico hasta su realización experimental.

Los aislantes topológicos representan una nueva fase electrónica, donde el interior del material es aislante, mientras que existen estados metálicos en la superficie o en los bordes. Estos estados electrónicos de borde están protegidos por las simetrías que protegen al invariante topológico. A diferencia de los aislantes comunes (triviales), semiconductores y metales, estos materiales tienen propiedades que caen fuera de la descripción usual. La teoría de bandas fue un gran logro en la física de la materia condensada para describir la estructura electrónica de muchos materiales, en particular de los semiconductores. Sin embargo, desde los 80's con el descubrimiento del efecto Hall cuántico (QHE) [20] en gases electrónicos bidimensionales (2DEG) inmersos en un fuerte campo magnético, el orden topológico [21] de los sistemas debió incorporarse a la teoría de bandas para describir las propiedades de transporte de estos sistemas, como la cuantización de la conductancia Hall [22].

1.2.1. El nacimiento de los aislantes topológicos

El modelo de Haldane, propuesto en 1988, es el primer modelo teórico que reproduce el efecto Hall cuántico (QHE). En un principio su importancia se vio

disminuida por tratarse de un artificio sin una relación clara con un sistema físico, donde los hoppings a segundos vecinos en una red hexagonal son imaginarios, Fig. 1.5, con signos opuestos para cada subred.

El modelo de Haldane incorpora hoppings a segundos vecinos, que corresponden a hoppings entre sitios de la misma subred. Estos hoppings imaginarios cambian de signo según vinculen sitios pertenecientes a la subred A o a la subred B . El Hamiltoniano del modelo de Haldane es

$$\mathcal{H} = t \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{c}_i \hat{c}_j^\dagger + t' \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \nu_{i,j} \hat{c}_i \hat{c}_j^\dagger + \text{h.c.},$$

donde $\langle\langle i,j \rangle\rangle$ denota la sumatoria a segundos vecinos y $\nu_{i,j} = -\nu_{j,i} = \pm i$ depende de la orientación del segundo vecino: si para ir del sitio i al j debemos hacer un giro a derecha, el signo es positivo y si el giro es a izquierda, el signo es negativo. En la Fig. 1.6 podemos ver la relación de dispersión del modelo de Haldane para una cinta de tipo zigzag, en la que se observan estados de borde que cruzan el gap e energía $\varepsilon = 0$.

Este modelo fue extendido por Kane y Mele para predecir el efecto espín-Hall cuántico (QSHE) en grafeno con acople espín-órbita (SO) lo suficientemente grande. Según este modelo, por medio acople SO intrínseco los electrones tienen acoples imaginarios a segundos vecinos, tal como en el modelo de Haldane, pero con signos opuestos para cada espín. En este caso existen dos estados de borde, que se propagan en direcciones opuestas y tienen espín opuesto. Esto es una consecuencia de que, a diferencia del QHE, el QSHE conserva la simetría de reversión temporal y está caracterizado por un nuevo invariante topológico del tipo \mathbf{Z}_2 . A pesar de que en grafeno el acople SO es muy débil, poco después de la propuesta de Kane y Mele, el efecto QSH fue predicho y comprobado experimentalmente en pozos cuánticos de HgTe/CdTe.

1.3. Sistemas forzados periódicamente

Los sistemas cuánticos sujetos a fuerzas periódicas pueden alterar su estructura electrónica, lo que brinda gran control sobre las propiedades de transporte [24, 25]. Los mecanismos para forzar estos sistemas pueden ser, por ejemplo, un gate periódico, para inducir bombeo cuántico [26, 27], o bien un campo electromagnético. En el último caso, muchas propiedades interesantes emergen, tales como efectos termoeléctricos [10], respuestas no lineales [28] y transiciones de fase cuánticas [29, 30].

La luz, más específicamente, el campo electromagnético al que está sujeta una muestra de grafeno u otro material de Dirac, cuando es irradiada por un láser pueden producir la apertura de gaps en el espectro [30, 31, 32], donde se desarrollan fases del tipo QHE o QSHE. Una gran variedad de materiales bidimensionales bajo la incidencia de luz, exhibe, por ejemplo, estados de tipo Hall polarizados en espín o

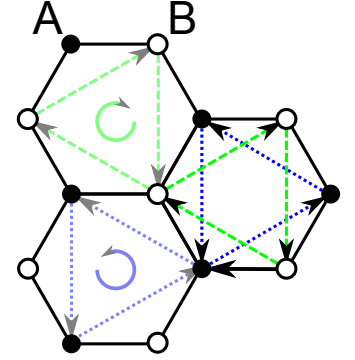


Fig. 1.5: Red hexagonal con hoppings imaginarios a segundos vecinos. La fase ganada en el hopping tiene el mismo signo cuando la dirección de hopping es la indicada por las flechas. El sentido de los hoppings entre sitios A es antihorario (líneas de puntos azules) y entre los sitios B es horario (líneas de trazos verdes). Figura adaptada de [4].

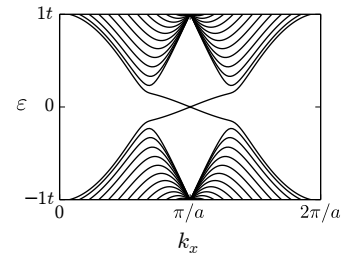


Fig. 1.6: Relación de dispersión para el modelo de Haldane, con los mismos parámetros que en Kane y Mele (2005) [23], con $t'/t = 0,03$, siendo t' el módulo del hopping imaginario a segundos vecinos. Para esta geometría (zigzag) los estados de borde conectan los valles K_{\pm} .

en valle en disulfuro de molibdeno (MoS_2) [33], corrientes polarizadas por valle en grafeno bicapa [31] y estados sintonizables en grafeno [34].

De manera análoga a los aislantes topológicos, que pueden ser usados para obtener canales coherentes de transporte de electrones sin disipación, los sistemas cuánticos sujetos a perturbaciones periódicas, desarrollan una estructura de bandas que se ve modificada y puede tener propiedades topológicas [35, 36]. La teoría de Floquet predice que las propiedades topológicas pueden ser inducidas incluso en materiales triviales [37, 38]. La luz podría ser usada como el mecanismo de control sobre los estados topológicos ya sea activando y desactivando estos canales, o bien cambiando su quiralidad y su dirección de propagación.

La actividad en este campo viene incrementando y se vio acelerada por la observación de estados de Floquet-Bloch en la superficie de un aislante topológico tridimensional [39]. Los estados topológicos también son simulados en redes ópticas [40], en átomos fríos [41], donde el campo de gauge es producido artificialmente.

1.4. Sobre esta tesis

El objetivo de esta tesis es explorar las propiedades de las nuevas fases electrónicas que la luz induce en grafeno y de manera similar en otros sistemas de Dirac. Por un lado, el grafeno brinda un candidato ideal para aplicaciones tecnológicas y nanodispositivos por sus sorprendentes propiedades de conducción, gran movilidad electrónica y por supuesto, la posibilidad de tener dispositivos nanométricos eficientes. Por el otro, la nueva fase electrónica de aislantes topológicos también brinda propiedades con gran potencial aplicación, como canales de conductancia cuasi-unidimensionales, ausencia de retrodispersión en el caso de aislantes tipo QHE y polarización en espín para el caso QSHE. Más aun, inducir propiedades topológicas en grafeno mediante la aplicación de un campo electromagnético une todas estas características en un sólo sistema y brinda gran capacidad de control sobre los estados topológicos.

CAPÍTULO 2

GAPS EN GRAFENO INDUCIDOS POR RADIACIÓN

Contenidos

2.1. Teoría de Floquet	12
2.1.1. El Hamiltoniano de Floquet	12
2.1.2. Hamiltoniano de Floquet en forma matricial	14
2.1.3. Réplicas de Floquet	15
2.1.4. Densidad de estados media	16
2.2. Efectos de la radiación en grafeno bulk	16
2.3. Efectos de la radiación en nanocintas	19
2.3.1. Nanocintas de grafeno	20
2.3.2. Cambios en la densidad de estados	21
2.4. Propiedades de transporte	25
2.5. Contribuciones originales	26

Abstract

El grafeno es uno de los principales candidatos a ser la base de nuevos nanodispositivos, debido a sus excelentes propiedades de conducción y gran movilidad electrónica. Sin embargo, carece de un gap que provea un mecanismo de encendido y apagado. Un láser provee la radiación coherente necesaria para inducir gaps en sistemas bidimensionales, en particular en grafeno. Al tratar a la radiación como una perturbación periódica en el tiempo podemos utilizar la teoría de Floquet para obtener el espectro electrónico donde se inducen gaps en el promedio temporal de la densidad local de estados a energías conmensuradas con la mitad de la energía fotónica.

Un láser puede producir modificaciones en la estructura electrónica del grafeno. Con el objetivo de abrir un gap en la densidad de estados promedio, investigamos los efectos de la radiación en grafeno, tanto para un sistema bulk como para distintos tipos de nanocintas, explorando los efectos que tiene la polarización de la radiación en cada caso.

Para describir al grafeno irradiado utilizamos la teoría de Floquet, en la que se incluyen los efectos de un campo electromagnético coherente como una per-

turbación temporal. En la primera sección se presenta la teoría de Floquet, como herramienta para analizar el espectro de cuasienergías de un Hamiltoniano sometido a un potencial dependiente periódicamente del tiempo. Seguido de esto, podremos entender las primeras evidencias teóricas donde se observan gaps inducidos por radiación en grafeno lejos del punto de Dirac [32]. Estos resultados constituyen el estado del arte de la teoría que describe estos sistemas al comienzo de esta tesis y forman la base sobre la cual construimos nuevos resultados. En la tercera sección se muestran los primeros resultados propios, investigando cómo se desarrollan los gaps en nanocintas de grafeno irradiado, según la dirección de la polarización respecto del borde de la cinta y del tipo de borde [42, 43]. Los gaps en el espectro de cuasienergías se reflejan en gaps de transporte a dos terminales. El modelo de scattering utilizado para hacer los cálculos de transporte y los resultados se presentan en la cuarta sección; y finalmente, en la quinta sección, un resumen de las contribuciones originales.

2.1. Teoría de Floquet

Cuando un sistema es sometido a una perturbación con dependencia temporal, la evolución temporal de los estados cuánticos está descrita por un Hamiltoniano dependiente del tiempo, a través de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \mathcal{H}(t)\Psi. \quad (2.1)$$

Para resolver esta ecuación usualmente se consideran dos regímenes. El primero, cuando la perturbación o la dependencia temporal del Hamiltoniano varían mucho más lentamente que los tiempos característicos del sistema, llamado *límite adiabático*; y el segundo cuando esta aproximación no se cumple y los tiempos característicos de la dinámica del sistema son comparables a la dependencia temporal del Hamiltoniano. En el caso de una perturbación periódica en el tiempo, debemos comparar el período T del Hamiltoniano con los tiempos característicos τ , por ejemplo el tiempo de pasaje electrónico por el sistema. Cuando estos tiempos son del mismo orden, la perturbación es *no adiabática*.

Consideramos una muestra de grafeno sometido al potencial electromagnético periódico de un láser coherente que se extiende en todo el dominio temporal y queremos conocer la solución del problema para todo tiempo, incluso tiempos largos. Para esto necesitamos una solución no adiabática y no perturbativa, dada por la teoría de Floquet.

2.1.1. El Hamiltoniano de Floquet

El teorema de Floquet, originalmente formulado por el matemático francés Achille Marie Gaston Floquet en 1883 para resolver ecuaciones diferenciales ordinarias, da

las soluciones a ecuaciones diferenciales lineales con coeficientes periódicos [44] y ha sido extendido al tratamiento de Hamiltonianos dependientes periódicamente del tiempo por Shirley y posteriormente por Sambe alrededor de 1970 [45, 46]. El formalismo de Floquet ofrece un método para obtener las soluciones al problema de autovalores de un Hamiltoniano dependiente periódicamente del tiempo, que es no perturbativa, válida para tiempos largos y más aún exacta. Este formalismo es análogo al teorema de Bloch, donde el potencial es periódico en el espacio y las soluciones al Hamiltoniano de Bloch están indexadas por el cuasimomento, que puede ser restringido a la primera zona de Brillouin. El teorema de Floquet hace uso de la periodicidad temporal del Hamiltoniano y los autovalores del Hamiltoniano de Floquet ε_α , llamados cuasienergías, también pueden restringirse a la primera zona de Floquet (FZ). Si imponemos la periodicidad temporal del Hamiltoniano, el sistema y sus soluciones tienen simetría discreta de traslación temporal^{*}. Es decir que, si T es el periodo del Hamiltoniano tal que $\mathcal{H}(t+T) = \mathcal{H}(t)$, luego cualquier función de onda Ψ_α que satisface la Ec. (2.1) debe ser invariante ante traslaciones temporales en T , a menos de una fase

$$\Psi_\alpha(t+T) = e^{-i\varepsilon_\alpha T/\hbar} \Psi_\alpha(t). \quad (2.2)$$

Dado que $e^{-in\Omega T} = 1$, podemos utilizar la identidad $e^{-i\varepsilon_\alpha T/\hbar} = e^{-i(\varepsilon_\alpha + n\hbar\Omega)T/\hbar}$, para acotar los valores posibles de ε_α al intervalo $(-\hbar\Omega/2, \hbar\Omega/2)$ y definir $\varepsilon_{\alpha,n} = \varepsilon_\alpha + n\hbar\Omega$.

En nuestro caso, la fase $e^{-i\varepsilon_\alpha T/\hbar}$ debe ser constante en el tiempo, ya que la dependencia temporal periódica del Hamiltoniano es la misma desde $t \rightarrow -\infty$ y la solución no puede depender del tiempo inicial t desde el cual definimos las funciones de onda. Por lo tanto, la función $e^{i\varepsilon_\alpha t/\hbar} \Psi_\alpha(t)$ debe ser invariante ante traslaciones temporales en un período del potencial T . Llamamos a esta función $\phi(t)$, que cumple

$$\Psi(t) = e^{-i\varepsilon_\alpha T/\hbar} \phi(t) \quad \phi(t+T) = \phi(t), \quad (2.3)$$

tal que la Ec. (2.2) se satisface inmediatamente. Insertando la Ec. (2.3) en la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, Ec. (2.1), obtenemos

$$\begin{aligned} \mathcal{H} \left(e^{-i\varepsilon_\alpha t/\hbar} \phi_\alpha(t) \right) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(e^{-i\varepsilon_\alpha t/\hbar} \phi_\alpha(t) \right) \\ e^{-i\varepsilon_\alpha t/\hbar} \mathcal{H} \phi_\alpha(t) &= e^{-i\varepsilon_\alpha t/\hbar} \left(\varepsilon_\alpha \phi_\alpha(t) + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi_\alpha(t) \right) \\ e^{-i\varepsilon_\alpha t/\hbar} \left[\mathcal{H} - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] \phi_\alpha(t) &= e^{-i\varepsilon_\alpha t/\hbar} \varepsilon_\alpha \phi_\alpha(t). \end{aligned}$$

Luego, obtenemos el siguiente problema de autovalores

$$\begin{aligned} \left[\mathcal{H} - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] \phi_\alpha(t) &= \varepsilon_\alpha \phi_\alpha(t) \\ \mathcal{H}_F \phi_\alpha(t) &= \varepsilon_\alpha \phi_\alpha(t), \end{aligned} \quad (2.4)$$

* Cuando un operador tiene una simetría discreta o continua y sus condiciones de borde también, entonces la solución al problema respeta estas simetrías.

donde \mathcal{H}_F es el Hamiltoniano de Floquet

$$\mathcal{H}_F = \mathcal{H} - i\hbar \frac{\partial}{\partial t}.$$

Esta forma del Hamiltoniano de Floquet es la de un operador dependiente del tiempo que actúa sobre las coordenadas del sistema y sobre la variable temporal. Podemos arribar a una expresión estática del Hamiltoniano de Floquet, como se describe en la subsección siguiente.

2.1.2. Hamiltoniano de Floquet en forma matricial

El Hamiltoniano de Floquet es un operador que actúa sobre la variable temporal. Al hacer un cambio de base adecuado podemos obtener una ecuación análoga a la ecuación de Schrödinger *independiente del tiempo*. Si expresamos los elementos de la Ec. (2.4) en la base $\{e^{in\Omega t}\}_n$ que expande las funciones temporales de periodo $T = 2\pi/\Omega$ obtenemos

$$\phi_\alpha(t) = \sum_m \phi_\alpha^m e^{im\Omega t} \quad \mathcal{H}(t) = \sum_{m'} \mathcal{H}^{m'} e^{im'\Omega t},$$

donde ϕ_α^n es la componente n -ésima de la serie de Fourier de $\phi_\alpha(t)$, al igual que \mathcal{H}^n lo es de $\mathcal{H}(t)$. Luego

$$\begin{aligned} \varepsilon_\alpha \sum_m \phi_\alpha^m e^{im\Omega t} &= \sum_{m',n} \mathcal{H}^{m'} \phi_\alpha^n e^{i(m'+n)\Omega t} + \sum_n n\hbar\Omega \phi_\alpha^n e^{in\Omega t} \\ \varepsilon_\alpha \phi_\alpha^m &= \sum_{m',n} \delta_{m'+n}^m \mathcal{H}^{m'} \phi_\alpha^n + \sum_n \delta_n^m n\hbar\Omega \phi_\alpha^n \\ \varepsilon_\alpha \phi_\alpha^m &= \sum_n [\mathcal{H}^{m-n} + n\hbar\Omega \delta_n^m] \phi_\alpha^n. \end{aligned} \quad (2.5)$$

En esta deducción sólo utilizamos la periodicidad temporal de $\phi(t)$ y $\mathcal{H}(t)$, por lo que sus componentes de Fourier tienen coordenadas espaciales, o de espín, que expanden el espacio de Hilbert del problema para el caso estático (sin dependencia temporal). El espacio de Hilbert para el caso estático \mathcal{R} producto el espacio de las funciones periódicas en el tiempo \mathcal{T} es el espacio de Sambe $\mathcal{R} \otimes \mathcal{T}$. Expandido en el espacio de Sambe [46], el Hamiltoniano de Floquet toma la forma matricial estática

$$\mathcal{H}_F = \begin{pmatrix} \ddots & & & & \\ \mathcal{H}^0 - \hbar\Omega & \mathcal{H}^{-1} & \mathcal{H}^{-2} & \dots & \\ \mathcal{H}^1 & \mathcal{H}^0 & \mathcal{H}^{-1} & \mathcal{H}^{-2} & \\ \mathcal{H}^2 & \mathcal{H}^1 & \mathcal{H}^0 + \hbar\Omega & \mathcal{H}^1 & \\ \dots & \mathcal{H}^2 & \mathcal{H}^1 & \mathcal{H}^0 + 2\hbar\Omega & \\ & & & & \ddots \end{pmatrix}, \quad (2.6)$$

cuyos autovectores $\phi_\alpha = (\dots, \phi_\alpha^{-1}, \phi_\alpha^0, \phi_\alpha^1, \phi_\alpha^2, \dots)^T$ asociados a autovalores ε_α diagonalizan el Hamiltoniano de Floquet, de manera análoga a un problema de autovalores de un Hamiltoniano estático pero en un espacio extendido.

2.1.3. Réplicas de Floquet

Al resolver el Hamiltoniano de Floquet en el espacio de Sambe $\mathcal{R} \otimes \mathcal{T}$ obtenemos un espectro de cuasienergías ε_α . La Ec. (2.6) es particularmente útil, ya que podemos comenzar a analizar el espectro de cuasienergías de \mathcal{H}_F . Cada bloque diagonal $\mathcal{H}^0 + n\hbar\Omega$ representa al sistema estático con energías desplazadas en $n\hbar\Omega$. A lo largo de esta tesis llamamos a cada uno de estos subespacios *réplicas de Floquet*, indexadas por el número n . La réplica de Floquet número n , representa al sistema estático excitado en energía y podemos interpretar que el sistema absorbió n fotones (emitió n fotones si $n < 0$).

La primer peculiaridad es que podemos sumar $n\hbar\Omega I$ al Hamiltoniano de Floquet en la ecuación (2.6) y obtener un problema de autovalores idéntico, ya que en esta representación la matriz del operador de Floquet es infinita, aunque las réplicas de Floquet están desplazadas: a la que antes llamábamos m ahora se encuentra en el lugar $n + m$. De esta forma se manifiesta la libertad de gauge de definir $\varepsilon_{\alpha,n} = \varepsilon_\alpha + n\hbar\Omega$, tal que ε_α pertenece a la primera zona de Floquet (FZ) en el intervalo de cuasienergías $(-\hbar\Omega/2, \hbar\Omega/2)$.

El espectro de Floquet, entonces debe ser invariante ante traslaciones en $n\hbar\Omega$ (aunque los autovectores tengan sus componentes desplazadas). Esto nos dice dos cosas: primero que el espectro de cuasienergías es no acotado y segundo que el espectro de cuasienergías es periódico [†].

Si consideramos un Hamiltoniano estático \mathcal{H}^0 con un espectro Δ , sometido a una perturbación o un potencial externo, periódico en el tiempo, entonces

$$\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}^0 + \lambda \mathcal{V}(t), \quad (2.7)$$

tal que $\mathcal{V}(t+T) = \mathcal{V}(t)$ y donde λ representa un parámetro que podemos modificar externamente para apagar y encender la perturbación. Podemos identificar al parámetro λ con alguna cantidad física de nuestro problema. Si la perturbación se produce por *proximidad* del sistema original (estático) a un potencial periódico, entonces λ es una función de la *distancia*; si el potencial es un potencial *electromagnético*, entonces λ es una función de la *intensidad* del campo; y en general representa la capacidad física de controlar la *amplitud* de la perturbación: para apagar el potencial $\lambda = 0$ y encenderlo $\lambda = 1$.

Si la perturbación $\mathcal{V}(t)$ es completamente sinusoidal $\mathcal{V}^0 = 0$ (sin componente estática), entonces los elementos no diagonales de \mathcal{H}_F serán las componentes de Fourier de $\mathcal{V}(t)$, tal que $\mathcal{H}^n = \lambda \mathcal{V}^n$ para $n \neq 0$. Si apagamos la perturbación poniendo $\lambda = 0$ en la Ec. (2.7), el Hamiltoniano de Floquet toma la forma de una matriz diagonal por bloques, con copias del sistema no perturbado \mathcal{H}^0 desplazado

[†]Debido a que el espectro de Floquet es periódico podemos restringirlo al intervalo $-\hbar\Omega/2 < \varepsilon_\alpha < \hbar\Omega/2$. Sin embargo, dado que los autovectores en el espacio de Sambe son diferentes, es útil mantener todos los autovalores para reconocer a qué réplica de Floquet pertenece cada componente de los autovectores ϕ_α .

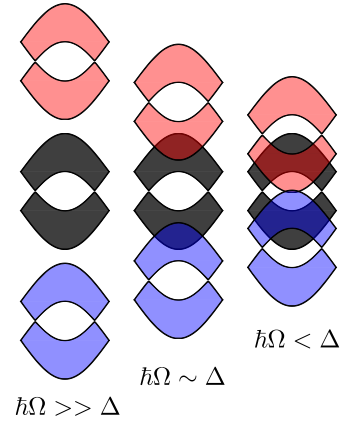


Fig. 2.1: Réplicas de Floquet de un sistema irradiado a distintas frecuencias. El ancho de banda del sistema es Δ , cuando $\hbar\Omega < \Delta$ hay solapamiento de las réplicas en $\varepsilon = \hbar\Omega/2$. Además, si $\hbar\Omega < \Delta/2$ también hay solapamiento en $\varepsilon = 0$.

en energía en cada réplica. En el límite $\lambda = 0$ todas las réplicas están desacopladas y el espectro de cuasienergías será el espectro de energías del sistema estático replicado a intervalos de $\hbar\Omega$.

Como vemos en la Fig. 2.1, si la frecuencia del potencial externo $\hbar\Omega$ es mucho más grande que el ancho de banda del sistema estático Δ , entonces las distintas réplicas no se solapan y no hay degeneración en el espectro de cuasienergías. Cuando disminuye la frecuencia al punto que $\hbar\Omega \leq \Delta$, el espectro comienza a estar degenerado. Dado que el sistema original tiene simetría electrón-hueco, es decir que por cada estado $\phi_{k,\alpha}$ con energía ε_α existe otro estado con energía $-\varepsilon_\alpha$, entonces a energía $\hbar\Omega/2$ y momento k habrá al menos dos estados degenerados; un estado perteneciente a la réplica 0 con energía $\varepsilon_\alpha = \hbar\Omega/2$ y un estado de la réplica 1 con energía $-\varepsilon_\alpha + \hbar\Omega = \hbar\Omega/2$. Cuando la perturbación $\mathcal{V}(t)$ contiene elementos de matriz que acoplan estos estados, al momento que encendamos el potencial externo ($\lambda > 0$) la degeneración se verá removida generando un cruce evitado.

2.1.4. Densidad de estados media

Para entender cómo se relaciona el formalismo de Floquet y el espectro de cuasienergías con una medición real, podemos calcular qué valor daría un instrumento que mida la densidad de estados. Suponemos que la frecuencia de oscilación del potencial es mucho más rápida que el tiempo de medición del instrumento. En este caso, debemos promediar la densidad de estados sobre un período T . Para calcular la densidad de estados promedio utilizamos el formalismo de funciones de Floquet-Green [47, 30], a partir del cual obtenemos

$$\rho(\varepsilon) = \int d\mathbf{k} \sum_{\alpha} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im} \left(\frac{\langle \phi_{\alpha}^0 | \phi_{\alpha}^0 \rangle}{\varepsilon - \varepsilon_{\alpha} + i\eta} \right). \quad (2.8)$$

En la Ec. (2.8) se pone de manifiesto la relación entre el promedio temporal de la función de onda de Floquet $\phi(t)$ y la proyección sobre la réplica de Floquet de orden cero. El peso w_{α}^n de un estado de Floquet sobre la réplica n es simplemente $w_{\alpha}^n = \langle \phi_{\alpha}^n | \phi_{\alpha}^n \rangle$. En el límite de intensidad cero ($\lambda = 0$ en la Ec. (2.7)), donde las réplicas están desacopladas, el estado indexado por α solo pertenecen a una réplica, es decir que si pertenece a la réplica m , entonces $w_{\alpha}^m = 1$ y $w_{\alpha}^n = 0$, si $n \neq m$.

2.2. Efectos de la radiación en grafeno bulk

El grafeno es un gran candidato a ser la materia prima de transistores más rápidos y más eficientes debido a su gran movilidad electrónica y capacidad de disipar el calor. Al ser un semiconductor de gap cero es necesario un mecanismo de encendido y apagado para controlar sus propiedades de transporte. La posibilidad de inducir un gap en grafeno mediante la incidencia de luz abre las posibilidades a aplicaciones de este material en transistores y nanodispositivos optoelectrónicos.

‡La proyección sobre la réplica cero cobra especial importancia, ya que la densidad de estados promediada en el tiempo coincide con la densidad de estados para el caso estático. Así recuperamos el sistema no perturbado cuando la intensidad de la perturbación tiende a cero.

En esta sección se discutirá un trabajo previo a esta tesis, donde los autores Calvo, Pastawski, Roche y Foa Torres en el artículo «Tuning laser-induced band gaps in graphene» [32], proponen utilizar un láser en el rango del infrarrojo ($\hbar\Omega \sim 140\text{meV}$) para abrir un gap apreciable y sintonizable a energías de la mitad de la frecuencia fotónica.

Los efectos de luz circularmente polarizada fueron estudiados previamente, donde se predice un pequeño gap en el punto de Dirac. Para frecuencias en el rango del visible [30], una muy alta potencia ($1\text{W}/\mu\text{m}^2$) es necesaria para abrir un gap apreciable; y para frecuencias en el infrarrojo lejano ($\hbar\Omega=29\text{ meV}$) [24] se analiza una juntura p-n y las fotocorrientes allí generadas. En cambio la propuesta de Calvo y col. [32], presentada en esta sección, explora frecuencias y potencias más accesibles, por ejemplo un láser de CO_2 de $I=32\text{ mW}/\mu\text{m}^2$ de potencia, que podría abrir un gap apreciable de $\approx 20\text{ meV}$ en grafeno. Además se muestran los efectos sobre la densidad de estados efectiva de distintas polarizaciones, de lineal a elíptica y circular. Trabajos más recientes estudian los efectos de la radiación en grafeno donde muestran la posibilidad de modificar los puntos de Dirac [48], inducir polarización de valle en grafeno bicapa [49], estudian las propiedades de transporte del grafeno irradiado [25, 50].

Para tratar el grafeno iluminado por un láser se necesita un método que de cuenta de los efectos no-perturbativos y no-adiabáticos, por lo que podemos utilizar el teorema de Floquet [45, 46]. Consideramos una muestra limpia de grafeno (sin defectos), donde la luz aplicada es perpendicular al plano del grafeno, por lo que el potencial electromagnético es homogéneo en el plano, no produce scattering entre valles y podemos considerar los valles K_+ y K_- por separado. En general solo utilizamos el valle K_+ , que denotamos K , excepto cuando sea necesario distinguirlos. A bajas energías usamos el modelo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ para entender las transiciones en el espacio recíproco (espacio \mathbf{k} de momentos) generadas por la luz. En este modelo hacemos uso de la sustitución canónica $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}(t)$, para dar cuenta de los efectos de la radiación. El Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ que describe el valle K es

$$\mathcal{H}_{kp}(t) = v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot [\mathbf{p} + e \mathbf{A}(t)], \quad (2.9)$$

donde $\boldsymbol{\sigma}$ son las matrices de Pauli y $\mathbf{A}(t)$ es el potencial electromagnético que describe a la radiación monocromática, coherente y polarizada

$$\mathbf{A}(t) = A_x \cos(\Omega t) \hat{\mathbf{x}} + A_y \cos(\Omega t + \phi_0) \hat{\mathbf{y}}. \quad (2.10)$$

Podemos tomar a las componentes $A_x = A_y = A_0$, de modo que nuestro parámetro que controla la polarización es la fase relativa ϕ_0 entre las componentes de $\mathbf{A}(t)$. Para $\phi_0 = 0$ la polarización es lineal en la dirección $(\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}})$, para $\phi_0 = \pi/2$ la polarización es circular y en valores intermedios la polarización es elíptica.

Armados del teorema de Floquet, podemos prever qué sucederá cuando el potencial vector acople las distintas réplicas de Floquet. A bajas energías podemos

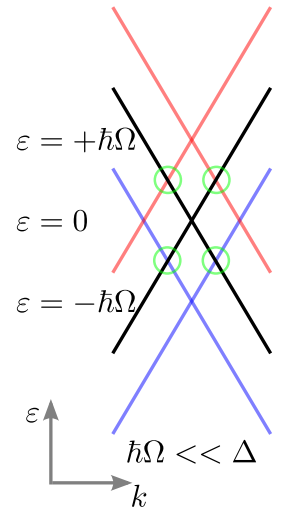


Fig. 2.2: Réplicas de Floquet para frecuencias $\hbar\Omega$ mucho menores que el ancho de banda Δ . A bajas energías los conos de Dirac describen la dispersión del sistema, sus réplicas se encuentran en $\pm\hbar\Omega$, denotadas en rojo y azul. Los círculos verdes muestran los cruces en $\hbar\Omega/2$ entre las bandas que pertenecen a réplicas aledañas.

describir al grafeno no perturbado como un cono de Dirac ($\mathcal{H}_0 = v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}$ en la Ec. (2.9)) replicado a energías $n\hbar\Omega$, como se esquematiza en la Fig. 2.2. Cuando la radiación acopla los estados que pertenecen a distintas réplicas, los efectos más importantes se observan cerca de las degeneraciones que ocurren a energías $\pm\hbar\Omega/2$.

Los resultados del modelo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ coinciden con los del modelo tight-binding, válido en un rango mayor de energías y es más preciso. El modelo tight-binding describe la red en el espacio real y en este caso la radiación actúa modulando los hoppings $t_{i,j}$ entre dos sitios ubicados en \mathbf{r}_i y \mathbf{r}_j , a través de la sustitución de Peierls

$$t_{i,j} \longrightarrow t_{i,j}(t) = t \exp\left(i \frac{2\pi}{\Phi_0} \int_{\mathbf{r}_i}^{\mathbf{r}_j} \mathbf{A}(t) d\mathbf{r}\right), \quad (2.11)$$

donde Φ_0 es el cuanto de flujo magnético y $t = 2,7\text{eV}$ es la amplitud de hopping típica para grafeno. La fase de los hoppings está modulada periódicamente en el tiempo y nuestro Hamiltoniano de red

$$\mathcal{H}_{\text{tb}}(t) = \sum_i \varepsilon_i \hat{c}_i \hat{c}_i^\dagger - \sum_{\langle i,j \rangle} t_{i,j}(t) \hat{c}_i \hat{c}_j^\dagger + \text{H.c.}, \quad (2.12)$$

también será periódicamente dependiente del tiempo.

Construimos el Hamiltoniano de Floquet-Bloch utilizando el formalismo del Apéndice A.1 y podemos obtener la densidad de estados mediante las funciones de Floquet-Green. En la Fig. 2.3 se muestran los resultados de la densidad de estados promedio para distintas polarizaciones. En (a) la polarización lineal produce efectos a energías $\pm\hbar\Omega/2$, que son la reducción en la densidad de estados media, aunque sin formar un gap. En el panel (b) y (c), la fase relativa $0 < \phi_0 < \pi/2$ produce polarizaciones elípticas y se observa un gap tanto en el punto de Dirac como a energías $\pm\hbar\Omega/2$. El máximo ancho del gap se produce para polarización circular, cuando $\phi_0 = \pi/2$.

En la Fig. 2.3 se puede observar que es la componente circular de la polarización la que abre los gaps, por lo que las polarizaciones elípticas, que pueden ser descompuestas en una parte circular y una lineal, abren un gap que es máximo cuando la polarización es completamente circular. Se puede estimar el ancho de este gap notando que tanto el cono de Dirac como la polarización circular son isotrópicos en el sentido de que todas las direcciones en el plano (k_x, k_y) son equivalentes y podemos elegir una dirección arbitraria en particular. En esta dirección el cruce evitado entre la réplica +1 y 0 abre un gap de $\Delta_{k=\Omega/2v_F} = e A_0 v_F$

Además, también se observa el gap estudiado por Oka y Aoki en la Ref. [30], que se abre en el punto de Dirac. Este gap es de segundo orden (más pequeño) ya que su ancho está dado por

$$\Delta_{k=0} = \sqrt{2} \frac{(e A_0 v_F)^2}{\hbar\Omega},$$

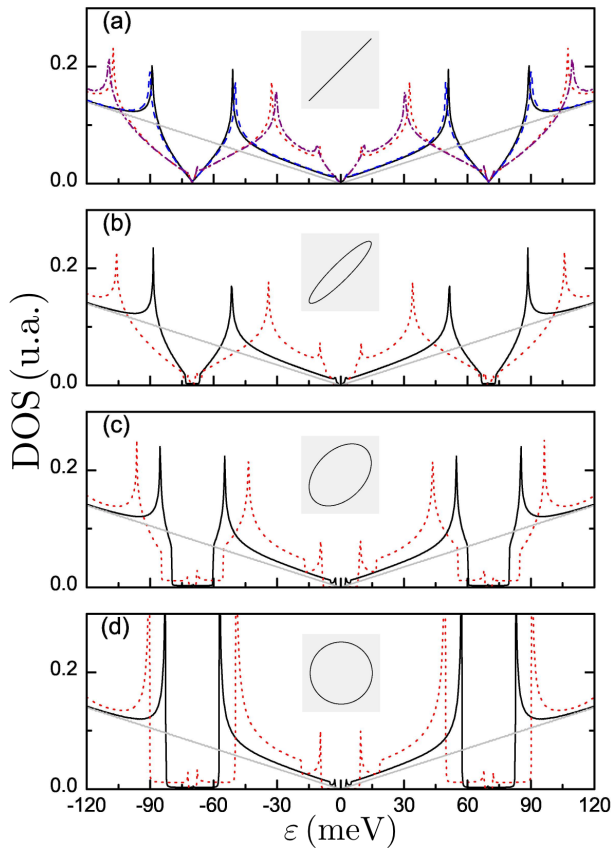


Fig. 2.3: DOS para una monocapa de grafeno iluminada por un láser de $\hbar\Omega = 140\text{meV}$, polarizada (a) linealmente, (b) elípticamente con $\phi_0 = \pi\frac{1}{8}$, (c) elípticamente con $\phi_0 = \pi\frac{3}{8}$ y (d) circularmente. La línea sólida negra es para intensidades de $I = 32\text{mW}/\mu\text{m}^2$ mientras que la línea roja punteada para $I = 130\text{mW}/\mu\text{m}^2$. Para polarización lineal se comparan los resultados con los del modelo tight-binding (en azul a trazos y violeta a trazos y puntos). *Figura adaptada de [32].*

y depende cuadráticamente de la intensidad del potencial vector.

Se puede observar que cuando la intensidad es grande aumenta la densidad de estados mínima dentro de los gaps, generando «sub-gaps» de orden superior. Estos efectos serán tratados con mayor profundidad en los Capítulos 3, 4 y 5, aunque rápidamente se puede entender que los efectos provienen de los cruces entre las bandas de las réplicas con $n \neq 0$ que se cruzan lejos de $k = 0$ en la Fig. 2.2.

2.3. Efectos de la radiación en nanocintas de grafeno

En la sección anterior se analizan los efectos de la radiación de distintas polarizaciones en una muestra bulk, es decir, infinita y sin tener en cuenta los bordes. En este caso se observan gaps cuando la polarización es circular y no se observan gaps cuando la polarización es lineal. En esta sección analizamos los efectos de la radiación de polarización lineal en nanocintas de grafeno (GNR's) y mostramos que es posible abrir gaps o cerrarlos si cambiamos la dirección de polarización lineal. La dirección de la polarización necesaria para abrir un gap depende fuertemente del tipo de borde de la nanocinta, lo que se puede explicar mediante las transiciones intra-modo e inter-modo que induce la radiación. Estos son los primeros resultados originales durante el desarrollo de esta tesis.

El grafeno presenta naturalmente bordes preferencialmente de dos tipos: zigzag y armchair. Utilizando como variables el tipo de borde y la dirección de la polarización veremos cómo se pueden abrir gaps en nanocintas de grafeno. La posibilidad de abrir

gaps incluso con polarización lineal diferencia las nanocintas del comportamiento para grafeno bulk. Estos gaps muestran conductancia cero, incluso con polarización lineal en los cálculos de transporte, lo que hace a las nanocintas un candidato ideal para diseñar dispositivos optoelectrónicos que hagan uso de un mecanismo de encendido y apagado del transporte electrónico.

2.3.1. Nanocintas de grafeno

Consideraremos dos tipos de nanocintas de grafeno, las de bordes de tipo zigzag (zGNR) y las nanocintas con bordes de tipo armchair (aGNR). En la Fig. 2.4 (a) se muestran las direcciones de corte (a) de ambos tipos de cintas. Un esquema de una cinta N-aGNR se muestra en el panel (b), con su celda unidad en líneas de puntos. El ancho W_a de la cinta es proporcional al número de filas de dímeros $W_a(N) = \sqrt{3}/2(N-1)a$. En el panel (c) se muestra una cinta N-zGNR, con su celda unidad y su ancho W_z depende del número de filas zigzag $W_z(N) = 3/2(N-1)a$. Una dirección de corte arbitraria, panel (d), es una combinación de tramos zigzag y armchair que ocurre cuando no se puede controlar el tipo de borde.

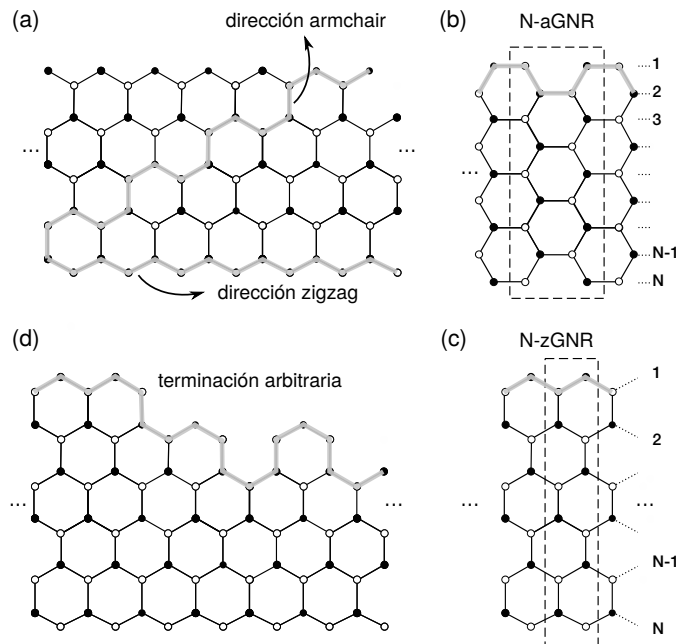


Fig. 2.4: (a) Red hexagonal de grafeno, en gris se muestran las direcciones de corte para obtener bordes de tipo zigzag y armchair. (b) aGNR de N filas de sitios de ancho. (c) zGNR de N filas de sitios de ancho. (d) Ejemplo de un borde arbitrario en una muestra de grafeno. *Figura adaptada de [4].*

Al confinar la función de onda electrónica dentro de una nanocinta, esperamos que los modos electrónicos dependan del ancho de la cinta y también de las condiciones de borde. Las condiciones de borde son de masa infinita, pedimos que la función de onda se anule en sitios virtuales justo por fuera del borde. La solución analítica se muestra en el Apéndice A.2, siguiendo el formalismo presentado por Marconcini y Macucci en la Ref. [51]. Como consecuencia del confinamiento el vector de onda transversal está cuantizado en $k_{\perp} = k_n$ y puede ser función de la componente paralela $k_{\perp} = k_{\perp}(k_{\parallel})$.

En el caso de los bordes zigzag, k_n sólo depende cerca de $k_{\parallel} \sim 0$ y para $k_{\parallel} > 1/W(N)$ se hace independiente de manera asintótica. Para el caso de la

cinta armchair, k_n es independiente de k_{\parallel} en todo su rango. En ambos casos $k_n(k_{\parallel})$ define superficies de corte en la zona de Brillouin, cuya intersección con la relación de dispersión para el grafeno bulk $\varepsilon(k_{\parallel}, k_n(k_{\parallel}))$ debemos proyectar sobre la dirección k_{\parallel} y tener en cuenta todos los modos n para obtener la dispersión de una nanocinta de grafeno.

Además de los modos extendidos, en las cintas zigzag existen modos que no están en la relación de dispersión bulk. Estos modos no pertenecen completamente a la zona de Brillouin ya que son modos evanescentes, caracterizados por $\text{Im}(k_{\perp}) \neq 0$ y están localizados en cada borde de la cinta zigzag. Cerca de $k_{\parallel} \sim 0$, la componente real de k_{\perp} es distinta de cero y los modos son metálicos (dispersivos). Sin embargo rápidamente al crecer $k_{\parallel} > 0$ la componente real de k_{\perp} decae exponencialmente, junto con ella la velocidad de este modo electrónico y crece la componente imaginaria, es decir que se localizan completamente y son prácticamente no dispersivos. Estos modos localizados reproducen a los modos que conectan los valles K_{\pm} del modelo tight-binding, como se muestra en la Fig. 2.5.

En las cintas armchair todos los modos permitidos son una combinación de modos con k_n y $-k_n$ del grafeno bulk y cada k_n define planos rectos de corte en la zona de Brillouin. Cuando un plano de corte pasa por los puntos K_{\pm} la cinta es metálica, esto sucede siempre que la cinta sea de ancho $N = 3 * p - 1$, con p un número entero. Cuando el número de filas de dímeros que definen el ancho de la cinta, no es $N \equiv 2 \pmod{3}$, la cinta es semiconductor, como se muestra en la Fig. 2.6.

Por convención, tomaremos las direcciones de corte mostradas en la Fig. 2.7 (a), siendo $\mathbf{a} = \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2$ y $\mathbf{z} = \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2$. Estas direcciones son las de simetría de desplazamiento espacial y debemos plegar la zona de Brillouin como muestra la zona gris en (b). En la Figs. 2.5 y 2.6 se muestran las relaciones de dispersión para cada tipo de cinta, que son la relación de dispersión para el grafeno bulk, pero plegada como la zona de Brillouin. En ambos casos las modificaciones más significativas que produce el tipo de borde se dan a bajas energías: (i) las zigzag las cintas son siempre metálicas, con estados localizados que conectan los valles K_{\pm} ; (ii) las cintas armchair no tienen estados localizados y según el ancho de la cinta son metálicas o semiconductoras.

2.3.2. Cambios en la densidad de estados

En las nanocintas de grafeno los efectos son más particulares y pueden ser más pronunciados, producto de un interjuego entre las transiciones propiciadas por la radiación y los modos transversales electrónicos permitidos. Los modos permitidos estarán dados por el tipo de borde y el ancho de la nanocinta y las transiciones permitidas o no permitidas tienen sus casos extremos cuando la polarización lineal es paralela o perpendicular al borde de la nanocinta.

Para describir el sistema, utilizamos el Hamiltoniano tight-binding donde los hoppings están modificados por la sustitución de Peierls, Ec. (2.12), para obtener

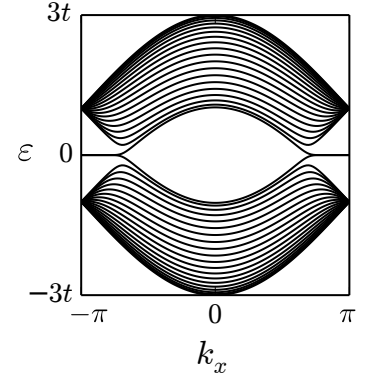


Fig. 2.5: Relación de dispersión para una cinta 20-zGNR.

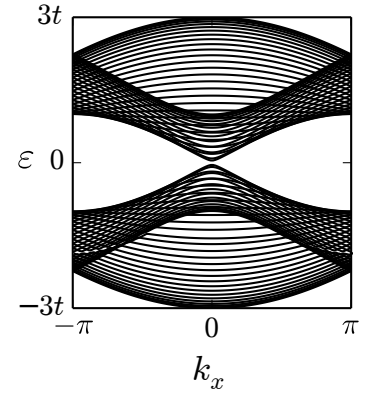
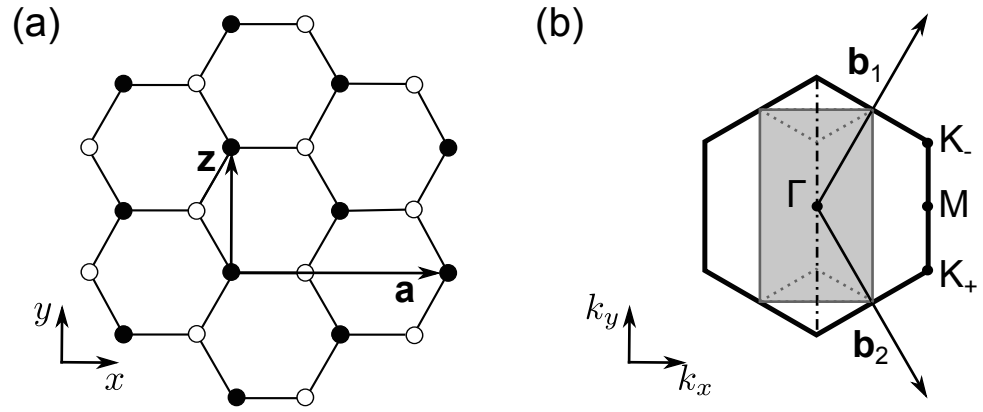


Fig. 2.6: Relación de dispersión para una cinta 19-aGNR semiconductor.

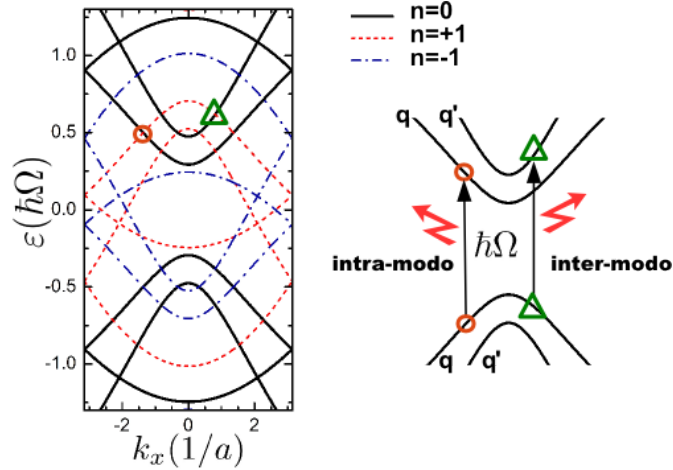
Fig. 2.7: (a) Red hexagonal de grafeno con sitios de tipo A y B denotados con círculos llenos y vacíos respectivamente. Los vectores \vec{a} y \vec{z} son los vectores de red y a la vez las direcciones de corte para obtener un borde armchair o zigzag. (b) Primera zona de Brillouin para una red hexagonal bulk y en gris para una red con borde armchair o zigzag. (c) y (d), relaciones de dispersión para una cinta con bordes armchair y zigzag, respectivamente. *Figura adaptada de [4].*



la DOS media como muestra la Ec. (2.8). La celda unidad crece con el ancho de la cinta y por lo tanto el costo computacional de aplicar el método recursivo de las funciones de Floquet-Green como se detalla en [47, 43]. Además, el número de réplicas de Floquet consideradas en el cálculo es un factor que multiplica el tamaño de la matriz celda unidad. Para intensidades bajas basta considerar ± 2 canales fotónicos para dar cuenta de las modificaciones en la DOS media.

Según el tipo de borde y la dirección de la polarización o bien las transiciones *inter-modo* o las *intra-modo* están permitidas (ver Apéndice A.2), como se muestra en la Fig. 2.8, mientras que para polarizaciones intermedias los dos tipos de transiciones ocurren.

Fig. 2.8: En el panel de la izquierda se muestra la relación de dispersión para una cinta armchair muy angosta. Los modos de las réplicas ± 1 (en líneas punteadas en rojo y azul) se cruzan con los modos de la réplica 0 (líneas continuas en negro). A la derecha un esquema que muestra las transiciones posibles. Si la transición es entre un modo q y uno distinto q' , la transición es *inter-modo*, cuando ambos modos tienen el mismo q , la transición es *intra-modo* [42].



Se observan reducciones en la densidad de estados media, que ocurren *exactamente* a $\hbar\Omega/2$ para las transiciones *intra-modo* o bien en posiciones aledañas para las transiciones *inter-modo*. Esto se debe a la simetría electrón-hueco dado que cuando existe un modo $\phi(\varepsilon, \mathbf{q})$ con energía ε , existe también $\phi(-\varepsilon, \mathbf{q})$ con energía $-\varepsilon$. Esto sucede para todas las réplicas de Floquet, por lo tanto las transiciones *intra-modo* se producen cuando el modo q de la réplica $n = 0$ se cruza con el modo $-q$ de la réplica $n = 1$ y el cruce (evitado) entre ellos se produce exactamente en $\hbar\Omega/2$. En cambio si las transiciones son *inter-modo*, cuando un modo q de la réplica

$n = 0$ se cruza con un modo $-q'$ de la réplica $n = 1$. La energía a la que se cruzan estos modos q y $-q'$ está desplazada de $\hbar\Omega/2$.

Las cintas armchair tienen transiciones *intra-modo* cuando la polarización se encuentra en la dirección \hat{x} paralela al borde. En la Fig. 2.9 se indica con una flecha la energía a la que ocurren las degeneraciones ($\hbar\Omega/2 = 70$ meV) y se ven las reducciones en la DOS de una cinta 83-aGNR semiconductor para polarización (a) en la dirección \hat{x} , (b) en la dirección \hat{y} y (c) circular, donde ambos tipos de transiciones ocurren. En el panel (a) se puede observar que en la cinta sin radiación tiene dos modos en electrónicos $\hbar\Omega/2$. Como ambos modos se cruzan con su par electrón-hueco de la réplica de Floquet siguiente, los dos modos desarrollan un cruce evitado y se forman dos gaps concéntricos. Los anchos de los gaps son distintos porque las transiciones son sensitivas a la componente transversal k_y del modo electrónico que acoplan. En el panel (b) la polarización en \hat{y} inhibe las transiciones *intra-modo* y propicia las transiciones *inter-modo*, por lo que se observan reducciones en la DOS «satélites» a $\hbar\Omega/2$. Según la intensidad de la radiación puede que se desarrollen verdaderos gaps o no. El gap a izquierda (energía menor que $\hbar\Omega/2$) cruza una singularidad de van Hove –que indican el comienzo de un modo electrónico– y se abre un gap en el primer modo electrónico. En el panel (c) podemos ver los efectos combinados de la polarización en \hat{x} junto con los efectos de la polarización en \hat{y} . Para cintas pequeñas e intensidades bajas las modificaciones producidas por la polarización circular no difieren cualitativamente de las de una polarización lineal en la dirección $\hat{x} + \hat{y}$. Sin embargo, como vimos en la Sección 2.2, en el límite bulk ambas polarizaciones producen efectos muy distintos. Mientras que la polarización circular abre un gap, la polarización lineal no abre un gap.

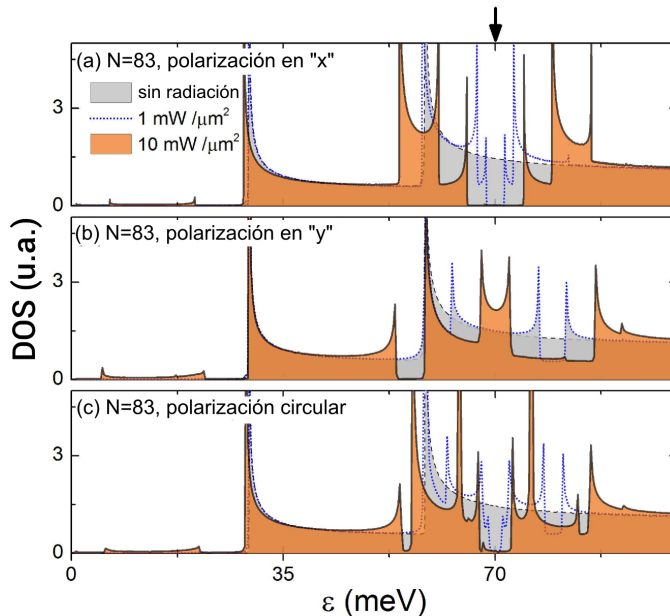
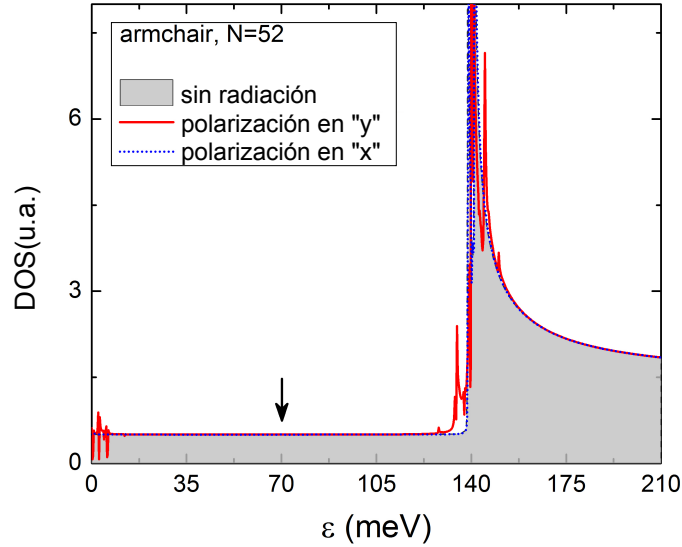


Fig. 2.9: Densidad de estados media para una cinta aGNR con $N = 83$ para polarización (a) lineal en la dirección \hat{x} , (b) en la dirección \hat{y} , y (c) circular [43].

Todas las cintas aGNR semiconductoras, desarrollan gaps a energías $\pm\hbar\Omega/2$ cuando la polarización incidente tiene una componente en k_x . Sin embargo, cuando la cinta es aGNR metálica, como se muestra en la Fig.2.10, el modo metálico muestra

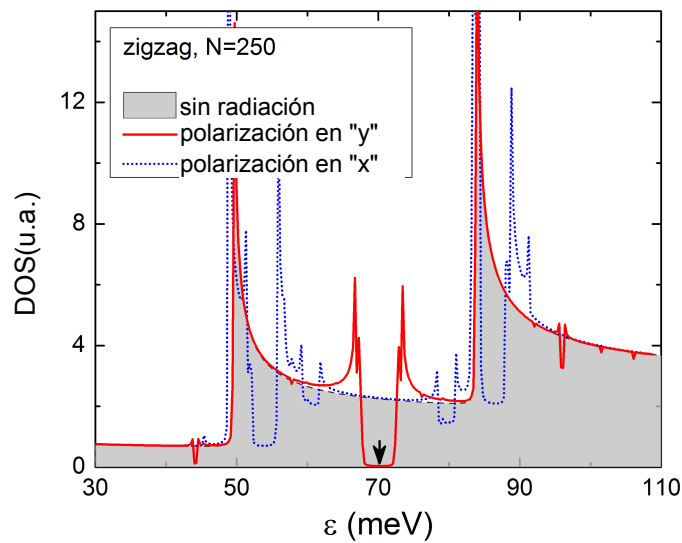
gran robustez frente a la radiación de polarización lineal en cualquier dirección. Si este es el único modo presente a energía $\varepsilon = \hbar\Omega/2$ no se observa un gap en la DOS y sólo ocurren modificaciones leves. En el caso en que más de un modo esté permitido a energía $\hbar\Omega/2$ en el sistema no perturbado, entonces habrá una reducción en la DOS, excepto para el modo metálico de la cinta.

Fig. 2.10: Densidad de estados media para una cinta aGNR con $N = 52$ metálica irradiada ($\hbar\Omega = 140\text{meV}$, $P = 1\text{mW}/\mu\text{m}^2$) con polarización lineal en la dirección \hat{x} (línea azul punteada) y (b) en la dirección \hat{y} (línea roja continua) [43].



Las cintas zigzag pueden ser analizadas de manera análoga a las armchair y en la Fig. 2.11 se observan efectos similares, con la gran diferencia de que ahora la polarización en \hat{y} es la que abre gaps en $\hbar\Omega/2$ y al polarización en \hat{x} abre los gaps satélites. A diferencia de las cintas armchair, las cintas zigzag son siempre metálicas y el estado metálico no es robusto frente a polarización lineal. Se observa un gap para polarización perpendicular a la dirección del borde, en la Fig. 2.11 para una cinta 250-zGNR. Cuando la polarización está en la dirección \hat{x} paralela al borde las reducciones en la DOS media son a energías aledañas a $\varepsilon = 70\text{meV}$.

Fig. 2.11: Densidad de estados media para una cinta zGNR con $N = 250$ metálica para polarización lineal en la dirección \hat{x} (línea azul punteada) y (b) en la dirección \hat{y} (línea roja continua) para una radiación de frecuencia $\hbar\Omega = 140\text{meV}$ y una potencia de $P = 1\text{mW}/\mu\text{m}^2$ [43].



En el análisis presentado hasta aquí, las nanocintas aGNR y zGNR muestran propiedades bien diferenciadas en cuanto a la modificación de la DOS efectiva,

y un comportamiento prácticamente opuesto respecto a la dirección de la polarización. Sin embargo, sabemos de los resultados bulk que en el límite de ancho muy grande, una cinta zigzag y una armchair deben aproximarse. Comprobamos numéricamente este límite cuando el número de bandas que se cruzan en $\hbar\Omega/2$ es grande. Para mantener un costo computacional accesible, aumentamos la frecuencia de la radiación, manteniendo el parámetro de acople $A_0/\hbar\Omega$ constante, para obtener cualitativamente el límite bulk en una cinta 300-aGNR. Lo que vemos en la Fig. 2.12 es que la polarización lineal, tanto en la dirección (a) \hat{x} , (b) \hat{y} y (c) $\hat{x} + \hat{y}$, produce reducciones en la DOS que se acumulan alrededor de $\hbar\Omega/2$. En cambio, la polarización circular (d) produce un gap en todos los modos semiconductores de esta cinta armchair y cabe notar que el estado metálico sigue mostrando robustez incluso para una polarización no lineal e intensidad muy grande. Como veremos en el capítulo siguiente, este estado es mucho más robusto de lo esperado y ocurre en cualquier tipo de borde.

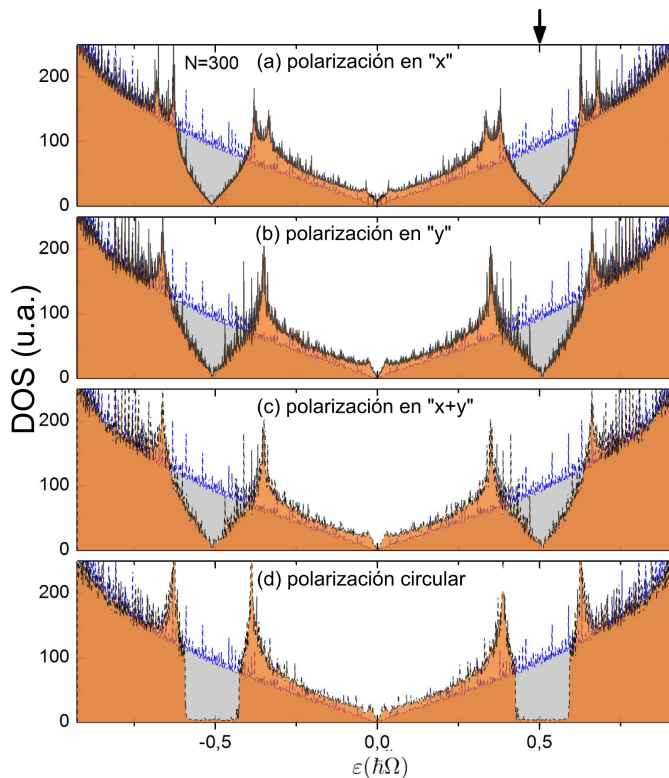


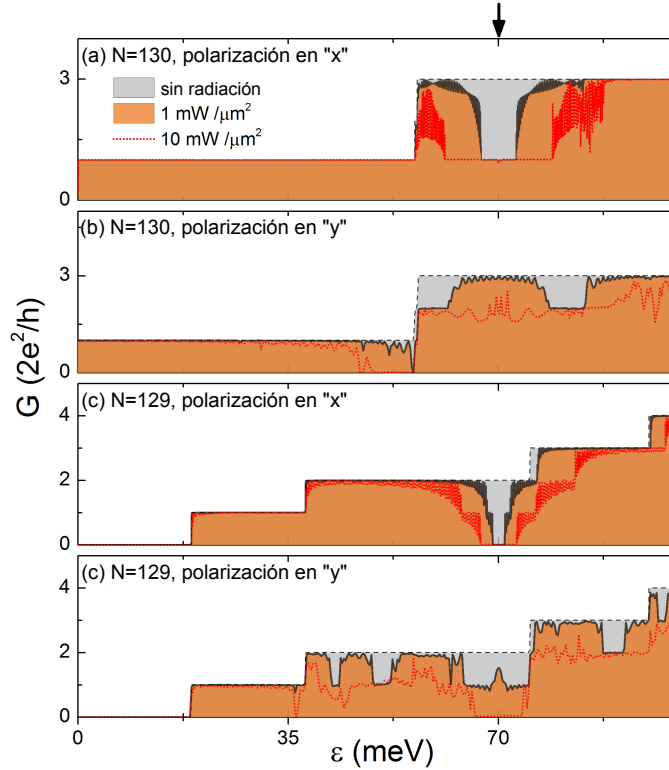
Fig. 2.12: DOS de una cinta aGNR con $N = 300$ metálica, en gris para sistema sin perturbar y en naranja la DOS media con radiación de frecuencia $\hbar\Omega = 2700\text{meV}$ y polarización lineal (a) en la dirección \hat{x} , (b) en la dirección \hat{y} , (c) en la dirección $\hat{x} + \hat{y}$ y (d) polarización circular [43].

2.4. Propiedades de transporte

Las modificaciones en la DOS promedio para las GNR's irradiadas, se reflejan en sus propiedades de transporte. Para describir los efectos del potencial periódico en el tiempo podemos utilizar las funciones de Green de no equilibrio y el formalismo de Keldysh [52] o equivalentemente el formalismo de scattering de Floquet. En la Fig. 2.13 podemos ver los resultados del cálculo de transporte a dos terminales para una cinta aGNR. En el caso de la cinta metálica, paneles (a) y (b), la polarización

lineal produce modificaciones en energías $\hbar\Omega/2$ o aledañas pero no logra anular la conductancia. En el caso de una cinta semiconductor, la radiación lineal (c) en la dirección de \hat{x} , produce un gap llevando la conductancia a cero; y la radiación lineal perpendicular (d) no logra reducir a cero la conductancia. Así podemos encender y apagar la conductancia de una cinta semimetálica a energía $\hbar\Omega/2$ o bien encendiendo y apagando la radiación o cambiando la dirección de la polarización.

Fig. 2.13: Transporte a dos terminales para un cinta armchair metálica, de longitud $N = 130$ para (a) y (b) y una cinta armchair semiconductor de longitud $N = 129$ para (c) y (d). En gris se muestra el perfil de conductancia para la muestra no irradiada, en naranja para una radiación de $1 \text{ mW}/\mu\text{m}^2$ y las líneas de puntos rojos para una radiación diez veces mayor. En los paneles (a) y (c) la polarización de la luz está en la dirección \hat{x} y en los paneles (b) y (d), la polarización está en la dirección \hat{y} [42].



2.5. Contribuciones originales

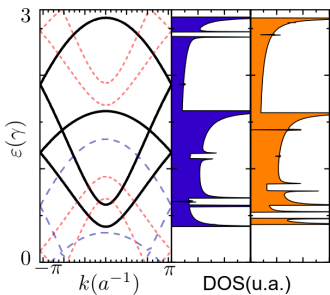


Fig. 2.14: Esquema donde se muestran a izquierda las bandas de una cinta armchair muy pequeña y los cruces evitados originados de las transiciones permitidas. A la derecha, la DOS de color azul (oscuro) se obtiene cuando la polarización es paralela a la cinta y la DOS naranja (claro) cuando es perpendicular.

- Desarrollo de códigos propios para calcular las funciones de Floquet-Green con el método recursivo, utilizadas para obtener la DOS promedio y también para realizar los cálculos de transporte a dos terminales. Los resultados obtenidos fueron comparados con códigos desarrollados paralelamente por Hernán Calvo y Luis Foà Torres para, de esta manera, verificar la corrección de los datos. Los códigos propios mostraron ser comparables en precisión y eficiencia.
- Estudiamos cómo la radiación de polarización lineal induce transiciones *intra-modo* o *inter-modo* en GNR's según el cómo se acople la radiación a los modos permitidos por las condiciones de contorno de la cinta, como se muestra en la Fig. 2.14.
- Obtenemos gaps en cintas armchair irradiadas con polarización lineal. Según la dirección de la polarización los gaps (o reducciones) en la DOS media ocurren a la mitad de la energía fotónica o en energías aledañas. Según el ancho de la

cinta encontraremos gaps o reducciones en la DOS media. En cintas metálicas el estado metálico es robusto a polarización lineal.

- Obtenemos gaps en cintas zigzag irradiadas con polarización lineal. Según la dirección de la polarización los gaps y reducciones en la DOS media ocurren a la mitad de la energía fotónica o en energías aledañas, para cintas de todos los anchos.
- Demostramos que podemos utilizar la dirección de la polarización como mecanismo de encendido y apagado en nanodispositivos basados en nanocintas de grafeno, para los dos tipos de cintas más abundantes, armchair GNR y zigzag GNR.

CAPÍTULO 3

ESTADOS TOPOLÓGICOS DE FLOQUET INDUCIDOS POR LÁSER

Contenidos

3.1. Estados de borde	30
3.1.1. Primeras evidencias	30
3.2. Cálculos analíticos	31
3.2.1. Gaps y estados de grafeno bulk	32
3.2.2. Estados quirales en grafeno zigzag	34
3.3. Topología de las bandas de Floquet	42
3.3.1. Distintos tipos de borde	45
3.3.2. Robustez del transporte	46
3.4. Contribuciones originales	48

Abstract

La radiación de polarización circular puede inducir gaps en la densidad de estados promedio de una muestra de grafeno bulk. Sin embargo, cuando la muestra tiene bordes, existen estados que persisten dentro del gap. Estos estados prueban ser quirales, es decir que los que se propagan en una dirección están localizados en un borde de la muestra, mientras que en el otro borde se propagan en la dirección opuesta. La quiralidad hace que la conductancia sea muy robusta frente a defectos estructurales y es una cualidad distintiva de los aislantes topológicos. Las propiedades topológicas no triviales pueden ser inducidas por la radiación y están caracterizadas con un invariante topológico, que muestra que el grafeno irradiado con luz circularmente polarizada es un aislante topológico de Floquet.

En este capítulo se muestran los principales resultados de esta tesis: la emergencia de estados quirales en grafeno irradiado [34], su caracterización analítica y sus propiedades topológicas [53]. Otros antecedentes del estudio de estados de borde en grafeno irradiado pueden encontrarse en [54, 55, 56] En la Sección 3.1 analizamos los resultados preliminares, acerca de la densidad de estados media y relación de dispersión efectiva para cintas de grafeno al incrementar el ancho de la cinta y disminuir los efectos de tamaño finito. Luego, en la Sección 3.2, demostramos analíticamente la existencia estados localizados en el borde zigzag de una

muestra de grafeno irradiado. En la Sección 3.3 mostramos que la presencia de los estados no dependen del tipo de borde y además, sus propiedades de transporte son robustas frente a defectos.

3.1. Estados de borde de Floquet inducidos por radiación

El grafeno bajo la incidencia de radiación desarrolla gaps en el interior del material a energías conmensuradas con la mitad de la frecuencia fotónica $n\hbar\Omega/2$. Cuando el material está confinado en una dirección, los modos normales que se propagan en esta dirección sufren modificaciones particulares según el tipo de borde y la dirección de la polarización, como se describió en la Sección 2.3. Muchos de estos efectos provenían de la interacción entre los efectos de tamaño finito y las transiciones entre distintos modos inducidas por la radiación. Además, mostramos que en las cintas armchair metálicas existen estados robustos frente a la radiación lineal y circular, incluso en el límite de una cinta muy ancha. En cambio en las cintas zigzag podíamos abrir gaps con polarización lineal y no se observaban estados robustos. ¿Son los estados robustos una particularidad de las cintas armchair metálicas, o existen para cintas de cualquier terminación? Vemos a continuación qué sucede con una cinta zigzag irradiada con polarización circular cuando el ancho de la cinta aumenta.

3.1.1. Primeras evidencias

Para entender las transiciones entre modos es útil graficar la relación de dispersión efectiva. Ésta consiste en obtener la densidad de estados media $\rho^0(\mathbf{k}, \varepsilon)$ de los modos k_x en la dirección de la cinta. Utilizamos las funciones de Floquet-Green [47, 43] para obtener $\rho^0(\mathbf{k}, \varepsilon)$, esta densidad de estados resuelta en k_x nos muestra la relación de dispersión efectiva.

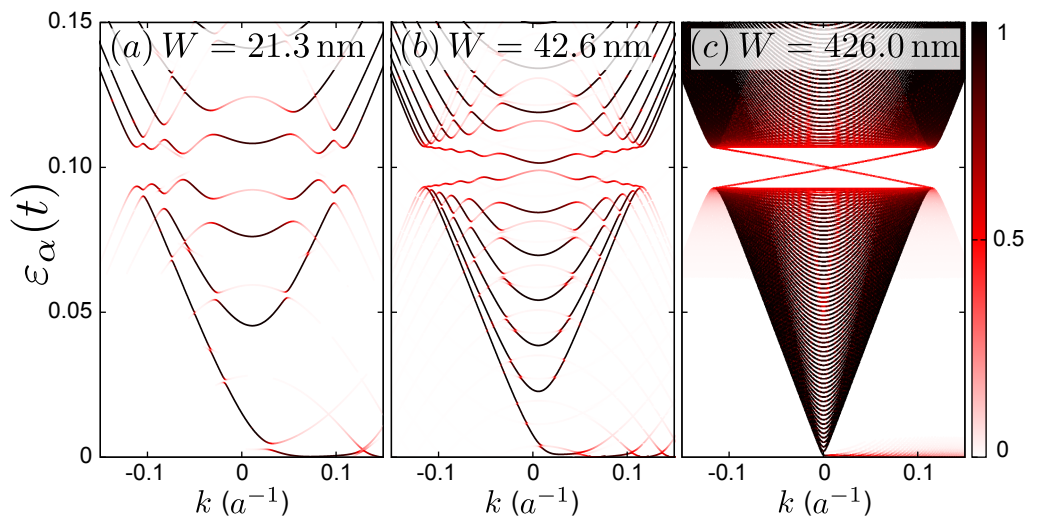


Fig. 3.1: Relación de dispersión efectiva para nanocintas de grafeno de borde zigzag. En color se muestra la contribución de los estados a la DOS media. En los paneles se muestran los resultados para (a) una cinta de 21,3nm, (b) una cinta de ancho 42,6nm y (c) una cinta de ancho 426nm. El gap dinámico aparece más claramente para cuando el ancho de la cinta crece. *Figura adaptada de [34]*

En la Fig. 3.1 exploramos los efectos de la radiación en una nanocinta de grafeno zigzag, para distintos anchos. Cuando el ancho es pequeño, paneles (a) y (b),

los efectos de tamaño finito, junto a las transiciones entre modos inducidas por la radiación (ver Sección 2.3), generan modificaciones en la densidad de estados media y en la relación de dispersión efectiva, donde los cruces evitados forman un gap en el espectro. Sin embargo, cuando el ancho de la cinta aumenta, panel (c), los efectos sobre la DOS media se acercan al límite bulk, donde claramente se observa un gap en las bandas de la nanocinta de grafeno, con la excepción de los estados que cruzan el gap. Éstos comienzan a insinuarse en el panel (b) y convergen a dos estados (por valle K_{\pm}) dispersivos cuando el ancho de la cinta aumenta, panel (c). Los estados permitidos están dados por las transiciones permitidas por la radiación en una cinta zigzag, aunque la presencia de los estados de borde no es accidental, y como veremos más adelante, las razones para la existencia de estos estados son más firmes y tienen sus bases en la topología del sistema irradiado.

Podemos evidenciar en la Fig. 3.1 (c) la primera diferencia entre los estados dentro del gap y los estados que forman las bandas en grafeno: El número de modos extendidos crece con el ancho de la cinta (estos estados forman las bandas en grafeno y corresponden con los modos permitidos en una muestra bulk), mientras que el número de estados dentro del gap rápidamente converge a un número finito (dos estados por valle K_{\pm}) que no crece con el ancho de la cinta. Podemos preguntarnos qué otras diferencias hay y en la Sección siguiente probamos si los estados dentro del gap se tratan de modos extendidos o de estados localizados en los bordes de la muestra.

3.2. Cálculos analíticos

Queremos entender cuáles son los modos permitidos tanto en el bulk del grafeno irradiado como en una muestra terminada en bordes zigzag. Para hacer esto comenzamos analizando el Hamiltoniano de Floquet-Bloch para bajas energías, luego obtenemos las propiedades de los estados de Floquet en el bulk del material y luego deducimos las soluciones del Hamiltoniano de Floquet imponiendo condiciones de borde zigzag. La comparación entre los resultados analíticos del modelo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ con los resultados numéricos del modelo tight-binding muestran muy buen acuerdo, tanto para cintas de grafeno como para una muestra semi-infinita.

La radiación que actúa sobre la muestra de grafeno puede ser descrita con el potencial vector $\mathbf{A}(t) = \text{Re}(\mathbf{A}_0 e^{i\Omega t})$ que describe el campo electromagnético que incide perpendicularmente a la muestra de grafeno, por lo que no tiene dependencia espacial en el plano (x, y) . La dirección de la polarización está dada por la dirección del vector \mathbf{A}_0 , que para polarización circular es $\mathbf{A}_0 = A_0(\hat{x} + i\hat{y})$. Podemos utilizar la sustitución canónica $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} + e\mathbf{A}$ en el modelo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ y obtenemos el Hamiltoniano dependiente del tiempo

$$\mathcal{H}(t) = \hbar v_F \left(\mathbf{k} + \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}(t) \right) \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (3.1)$$

Construimos a partir del Hamiltoniano de la Ec. (3.1) el Hamiltoniano de Bloch, que en el espacio de Sambe toma la forma matricial

$$\mathcal{H}_F^\infty = \begin{pmatrix} \ddots & & & & \\ \cdots & \hbar v_F \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \hbar \Omega \mathbf{I} & \frac{v_F e}{2c} A_0 \sigma_- & & \ddots \\ \cdots & \frac{v_F e}{2c} A_0 \sigma_+ & \hbar v_F \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} & \frac{v_F e}{2c} A_0 \sigma_- & \cdots \\ \cdots & & \mathbf{0} & \frac{v_F e}{2c} A_0 \sigma_+ & \hbar v_F \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} - \hbar \Omega \mathbf{I} & \cdots \\ \ddots & & & & & \ddots \end{pmatrix}, \quad (3.2)$$

donde $\sigma_\pm = (\sigma_x \pm i\sigma_y)$. De modo que cambiamos la representación temporal de la perturbación, Ec. (3.1), por una representación estática en el Hamiltoniano de Floquet infinito, Ec. (3.2).

El Hamiltoniano de Floquet es una matriz tridiagonal por bloques, donde los bloques diagonales representan las réplicas de Floquet y los bloques fuera de la diagonal representan el acople entre réplicas. Utilizaremos el parámetro de acople $\eta = \frac{e v_F A_0}{\hbar \Omega}$ y trabajaremos en el régimen de acople débil ($\eta \ll 1$). En la Fig. 3.2 están representadas las réplicas $n = -1, 0, +1$. Los cruces entre réplicas de primer orden en el acople están denotados por círculos, los cruces de segundo orden por triángulos y los cuadrados representan la renormalización de las bandas debido a los procesos de absorción y reemisión de fotones, por lo que se abre un gap también de segundo orden ($\mathcal{O}(\eta^2)$).

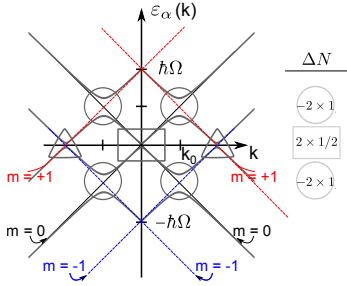


Fig. 3.2: Esquema donde se aprecian los cruces entre réplicas más relevantes. Los círculos denotan los cruces entre réplicas 0 y ± 1 y los triángulos los cruces entre las réplicas 1 y -1 . Los rectángulos en $k_x = 0$ indican el gap en $\varepsilon = n\hbar\Omega$ que proviene de la renormalización de las bandas [53].

3.2.1. Gaps y estados de grafeno bulk

En el régimen de acople débil, nos centraremos en los procesos de primer orden en η , que son los más significativos. Queremos describir el espectro de Floquet y los estados para energías cercanas a $\hbar\Omega/2$ (círculos superiores en la Fig. 3.2) donde se cruzan las réplicas $n = 0$ y $n = 1$, por lo que podemos truncar el Hamiltoniano de Floquet y restringirlo a estos dos subespacios

$$\mathcal{H}_F = \begin{pmatrix} \hbar v_F \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \hbar \Omega \mathbf{I} & \frac{v_F e}{2} A_0 \sigma_- \\ \frac{v_F e}{2} A_0 \sigma_+ & \hbar v_F \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

El bulk del grafeno presenta gaps en la DOS media, inducidos por radiación de polarización circular (Sección 2.2). En la Fig. 3.3 están representados los estados en el espacio \mathbf{k} que pertenecen al espectro de Floquet y cuya contribución a la DOS media se indica por la transparencia.

Para describir los estados del espectro de cuasienergías reescribimos el Hamiltoniano de Floquet truncado a las réplicas $n = 0$ y $n = 1$,

$$\tilde{\mathcal{H}}_F = \begin{pmatrix} \frac{\hbar\Omega}{2} & \hbar v_F k_- & 0 & 0 \\ \hbar v_F k_+ & \frac{\hbar\Omega}{2} & \frac{v_F e}{c} A_0 & 0 \\ 0 & \frac{v_F e}{c} A_0 & -\frac{\hbar\Omega}{2} & \hbar v_F k_- \\ 0 & 0 & \hbar v_F k_+ & -\frac{\hbar\Omega}{2} \end{pmatrix} + \frac{\hbar\Omega}{2} \mathbf{I}, \quad (3.4)$$

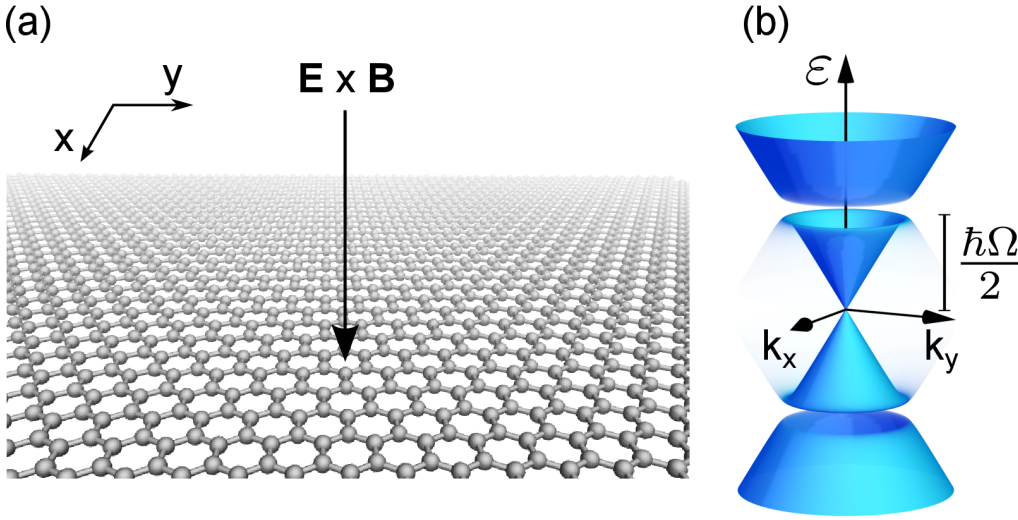


Fig. 3.3: (a) Grafeno bulk irradiado. El campo electromagnético es homogéneo en el plano del grafeno dada la incidencia normal de la radiación. (b) Esquema que muestra la relación de dispersión tridimensional efectiva para k cerca de K_{\pm} a bajas energías. La transparencia de la superficie indica el peso sobre la réplica 0. Figura adaptada de [53]

cuyas energías $\varepsilon_{k,\alpha}$ tienen autofunciones

$$\phi_{k,\alpha}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \{u_{1A}^{k,\alpha}, u_{1B}^{k,\alpha}, u_{0A}^{k,\alpha}, u_{0B}^{k,\alpha}\}^T, \quad (3.5)$$

donde $u_{iA,B}^{k,\alpha}$ es la amplitud de la función de onda en la réplica i en cada subred.

Cuando la amplitud del campo electromagnético es cero $A_0 = 0$ (apagamos la radiación), encontramos que las energías son $\varepsilon_{0,k}^{\pm} = \pm\hbar v_F k$ y $\varepsilon_{1,k}^{\pm} = \hbar\Omega \pm \hbar v_F k$. Dos de estas ramas están degeneradas en $k_0 = \Omega/2v_F$, donde $\varepsilon_{0,k_0}^+ = \varepsilon_{1,k_0}^-$. Al encender la radiación $A_0 > 0$ la degeneración en $\hbar\Omega/2$ se transforma en un cruce evitado, abriendo un gap en el espectro de Floquet. Podemos encontrar todas las soluciones al Hamiltoniano de la Ec. (3.4) introduciendo el vector de la Ec. (3.5) y resolviendo el sistema, aunque en nuestro caso es útil restringir aun más el problema, considerando sólo las ramas que se cruzan en $\hbar\Omega/2$. Considerando sólo este subespacio podemos ver que las energías de las ramas cuasi-degeneradas son

$$\varepsilon_{\pm} = \frac{\hbar\Omega}{2}(1 + \mu_{\pm}); \quad \mu_{\pm} = \sqrt{(1 - k/k_0)^2 + \eta^2}, \quad (3.6)$$

esquematizadas en la Fig. 3.3

Las autofunciones del Hamiltoniano completo son

$$\phi_{k,\alpha}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \frac{1}{\sqrt{2\mathcal{A}}} \times \begin{pmatrix} -\sin(\varphi_k^{\pm}/2) e^{i\theta_k} \\ \sin(\varphi_k^{\pm}/2) \\ \cos(\varphi_k^{\pm}/2) e^{i\theta_k} \\ \cos(\varphi_k^{\pm}/2) \end{pmatrix}, \quad (3.7)$$

donde \mathcal{A} es el área de la muestra de grafeno, θ_k es el ángulo entre \mathbf{k} y el eje x y el ángulo φ_k^{\pm} es una medida de cuán cerca está k del gap,

$$\tan \varphi_k^{\pm} = -\frac{\eta}{1 - k/k_0}, \quad (3.8)$$

siendo $\varphi_k^\pm \sim \eta$ lejos de $k = k_0$ y $\varphi_k^\pm = \pm\pi/2$ en el límite $k \rightarrow k_0^\pm$. La velocidad instantánea de los estados es el valor de expectación del operador $v = v_F \sigma$ que podemos descomponer en componentes paralelas (v_{\parallel}) y perpendiculares (v_{\perp}) respecto del vector de onda k , y en nuestro caso

$$\begin{aligned}\langle v_{\parallel} \rangle_{k\pm} &= v_F \cos \varphi_k^\pm \\ &= v_F \frac{1 - k/k_0}{\mu_{\pm}} \\ \langle v_{\perp} \rangle_{k\pm} &= v_F \sin \varphi_k^\pm \sin \Omega t \\ &= -v_F \frac{\eta}{\mu_{\pm}} \sin \Omega t.\end{aligned}\tag{3.9}$$

Podemos ver que v_{\perp} oscila con la frecuencia de la radiación, mientras que v_{\parallel} es constante. Los valores de la velocidad promediadas en el tiempo

$$\begin{aligned}\langle \langle v_{\parallel} \rangle \rangle_{k\pm} &= v_F \cos \varphi_k^\pm \\ &= v_F \frac{k_0 - k}{k_0 \mu_{\pm}} \\ \langle \langle v_{\perp} \rangle \rangle_{k\pm} &= 0,\end{aligned}\tag{3.10}$$

donde $\langle \langle \rangle \rangle$ denota el promedio temporal del valor de expectación. La Ec. (3.10) indica que las autofunciones se propagan (en promedio) en la dirección de \hat{k} , es decir, paralelos al vector de onda. Además observamos que el valor de v_{\parallel} tiene el signo de μ_{\pm} para $k < k_0$ y el signo opuesto para $k > k_0$, llegando a velocidad cero cuando $k = k_0$. También podemos calcular la componente $\langle \sigma_z \rangle_{k\pm} = \sin \varphi_k^\pm \cos \Omega t$, lo que nos dice que el pseudoespín precesa alrededor de la dirección \hat{k} con la frecuencia de la radiación y la amplitud de oscilación es máxima en $k = k_0$

$$\langle \sigma \rangle_{k\pm} = \hat{k} \cos \varphi_k^\pm + (\hat{z} \times \hat{k} \sin \varphi_k^\pm \sin \Omega t + \hat{z} \cos \Omega t).\tag{3.11}$$

3.2.2. Estados quirales de borde en grafeno con terminación zigzag

Los bordes de grafeno de tipo zigzag se caracterizan por que la primera fila de sitios pertenece a una misma subred mientras que la última fila de sitios es del tipo opuesto.

Supongamos que cortamos nuestro plano de grafeno por el eje y y analizamos las soluciones para el semiplano $y > 0$. Las condiciones de borde de masa infinita cuando la primera fila en $y = a_0$ es de sitios de tipo A exigen que la función de onda se anule en el borde $y = 0$, donde están los sitios virtuales que pertenecen a la subred B . Esta condición de borde es particularmente útil ya que para satisfacer estas condiciones de contorno, no es necesario acoplar estados pertenecientes a los distintos valles y podemos tratar los valles K_{\pm} por separado. La invarianza traslacional en la dirección x , nos dice que esperamos soluciones proporcionales a $e^{ik_x x}$, mientras que los estados no se propagan más allá del borde y esperamos soluciones tengan velocidad $v_y = 0$. Una forma de obtener esto es acoplar el modo

(bulk) correspondiente al vector de onda (k_x, k_y) con el modo que se propaga en $(k_x, -k_y)$. Las soluciones de este tipo existen siempre que existan los modos bulk, por lo que no hay soluciones de este tipo dentro del gap.

Buscamos soluciones a la ecuación diferencial con condiciones de borde, cuyas energías estén dentro del gap (bulk). Como no existen modos extendidos dentro del gap, las soluciones tienen que ser exponenciales de la forma $\exp((ik_y + q)y)$, donde $\{k_y, q\} \in \mathbb{R}$. Debemos imponer $q < 0$ a las soluciones localizadas en el borde del plano semi-infinito (aunque conservamos ambas soluciones para utilizarlas más adelante), siendo $-1/q$ la longitud de localización. Además, para satisfacer las condiciones de contorno es necesario superponer los modos con $\pm k_y$ y finalmente podemos reescribir la Ec. (3.5) para las soluciones dentro del gap como

$$u_{iA(B)}(\mathbf{r}) = \mathcal{C} e^{ik_x x} e^{qy} \mathcal{Q}_{iA(B)}(y). \quad (3.12)$$

Utilizamos la Ec. (3.12) para obtener las soluciones al Hamiltoniano de la Ec. (3.4) que toman la forma

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}_{1A}(y) &= -\sqrt{\frac{1+4\eta^2-\mu^2}{1+\mu}} \sin(k_y y + \theta_k), \\ \mathcal{Q}_{1B}(y) &= i\sqrt{1-\mu} \sin(k_y y), \\ \mathcal{Q}_{0A}(y) &= \pm i\sqrt{1+\mu} \sin(k_y y + \varphi_k), \\ \mathcal{Q}_{0B}(y) &= \mp\sqrt{1+\mu} \sin(k_y y), \end{aligned} \quad (3.13)$$

donde \mathcal{C} es la constante de normalización y

$$e^{i\varphi_k} = \frac{k_x - q + ik_y}{|k_x - q + ik_y|}; \quad e^{i\theta_k} = \frac{k_x + q + ik_y}{|k_x + q + ik_y|}. \quad (3.14)$$

Podemos ver que la función de onda oscila y decae hacia el interior de la muestra con un decaimiento dado por

$$q = \mp \frac{1}{2\xi} \sqrt{\frac{1-\mu}{1+\mu}}, \quad (3.15)$$

donde $\xi = \hbar\Omega/eE_0$ es la longitud característica, siendo E_0 la amplitud del campo eléctrico $E_0 = \Omega A_0/c$. La parte oscilante de la función de onda k_y es

$$k_y = \sqrt{\frac{\varepsilon^2}{(\hbar v_F)^2} - (k_x - q)^2} = k_0 \sqrt{\frac{1+\mu}{1-\mu}} \sqrt{1 - \frac{\mu^2}{\Delta^2}}, \quad (3.16)$$

donde $\hbar\Omega\Delta = \hbar\Omega\eta/\sqrt{1+\eta^2}$ es el ancho del gap calculado para la matriz completa en la Ec. (3.4).

La relación de dispersión $\varepsilon(k_x)$ se obtiene de las raíces de la ecuación

$$\mu(1+\mu) - \eta^2(1-\mu) \mp \eta k_x/k_0 \sqrt{1-\mu^2} = 0, \quad (3.17)$$

* Es notable ver que la longitud de decaimiento sólo está dada por los parámetros de la radiación y no por los detalles del material. En particular vemos que como consecuencia de la relación de dispersión lineal a bajas energías, la longitud de decaimiento es independiente de la velocidad de Fermi para grafeno.

que toma dos valores reales para k_y dentro del gap dinámico. Las soluciones las denotamos con $\phi_{K,\mp}^A$, enfatizando que corresponden a las soluciones para el valle K_+ –que para simplificar la notación llamamos $K-$ y para una cinta zigzag terminada en sitios A . Las soluciones toman una forma más simple cuando la energía yace cercana al centro del gap dinámico $\hbar\Omega/2$, donde podemos aproximar

$$\bar{\varepsilon}(k_x) = \varepsilon(k_x)/\hbar\Omega \approx \frac{(1+2\eta^2)}{2(1+\eta^2)} \pm \frac{\eta}{2(1+\eta^2)} \frac{k_x}{k_0}. \quad (3.18)$$

Esta solución es lineal en k_x y corresponde a estados de borde sin masa y cuya velocidad es constante. La solución para $\varepsilon = \hbar\Omega/2$ cumple que $k_y = k_0$, y $k_x = q = -1/2\xi$ y la función de onda en el dominio temporal es

$$\psi_{K,-}^A(\mathbf{r}, t) = e^{-ix/2\xi} e^{-y/2\xi} (2\xi L_x)^{-\frac{1}{2}} \times \left[\begin{pmatrix} -\cos k_0 y + 2\eta \sin k_0 y \\ i \sin k_0 y \end{pmatrix} e^{i\Omega t} + \begin{pmatrix} i \cos k_0 y \\ -\sin k_0 y \end{pmatrix} \right], \quad (3.19)$$

donde el superíndice indica el tipo de borde, los subíndices el valle K y el signo de q y donde L_x es la longitud de la muestra asumiendo condiciones periódicas de contorno. Las oscilaciones perpendiculares al borde dependen de $k_0 = \Omega/v_F$, por lo que no dependen de la intensidad de la radiación pero sí de la frecuencia y la velocidad de Fermi para grafeno. El período de las oscilaciones transversales por la longitud de decaimiento es $2k_0\xi = 1/\eta$ y nos da un estimativo de la cantidad de oscilaciones que tendrán los estados de borde, por lo que para nuestra elección de parámetros (acople débil $\eta \ll 1$) se observan muchas oscilaciones antes de que el estado decaiga hacia el bulk.

Cintas de grafeno

En el caso de una cinta de grafeno zigzag, también debemos obtener las soluciones para el borde opuesto en $y = W$. Si suponemos que la cinta es muy ancha ($W \gg \xi$), entonces las soluciones localizadas cada borde son independientes entre ellas. Podemos utilizar la solución deducida anteriormente (Ec. (3.13)) para describir el borde en $y = 0$, mientras que para el borde $y = W$ definimos $\tilde{y} = y - W$ y seguimos las mismas deducciones, esta vez recordando que la solución con $\tilde{q} > 0$ es válida (aunque conservamos ambas soluciones), ya que queremos un decaimiento exponencial de la forma $\exp(\tilde{q}\tilde{y})$ para $\tilde{y} < 0$.

$$\tilde{u}_{iA(B)}(\mathbf{r}) = C' e^{ik_x x} e^{\tilde{q}\tilde{y}} \tilde{Q}_{iA(B)}(\tilde{y}), \quad (3.20)$$

con

$$\begin{aligned}
 \tilde{Q}_{1A}(\tilde{y}) &= \sqrt{1-\mu} \sin(k_y \tilde{y}), \\
 \tilde{Q}_{1B}(\tilde{y}) &= -i\sqrt{1-\mu} \sin(k_y \tilde{y} - \theta_k), \\
 \tilde{Q}_{0A}(\tilde{y}) &= \pm i\sqrt{1+\mu} \sin(k_y \tilde{y}), \\
 \tilde{Q}_{0B}(\tilde{y}) &= \mp \sqrt{\frac{1+4\eta^2-\mu^2}{1-\mu}} \sin(k_y \tilde{x} - \varphi_k),
 \end{aligned} \tag{3.21}$$

y longitud de decaimiento

$$\tilde{q} = \pm \frac{1}{2\xi} \sqrt{\frac{1+\mu}{1-\mu}}. \tag{3.22}$$

Comparamos el decaimiento exponencial q con \tilde{q} y notamos que a una misma energía difieren entre ellos y se cumple

$$\tilde{q} = -q \frac{1+\mu}{1-\mu}; \quad q\tilde{q} = -\left(\frac{1}{2\xi}\right)^2. \tag{3.23}$$

En consecuencia, las oscilaciones transversales también difieren levemente siendo

$$k_x = k_0 \sqrt{\frac{1-\mu}{1+\mu}} \sqrt{1 - \frac{\mu^2}{\Delta^2}}. \tag{3.24}$$

La relación de dispersión se obtiene de las soluciones de

$$-\mu(1-\mu) - \eta^2(1+\mu) \mp \eta k_y/k_0 \sqrt{1-\mu^2} = 0, \tag{3.25}$$

que denotamos $\phi_{K,\pm}^B$ para las funciones de onda definidas en el valle K para un borde zigzag terminado en sitios B . La relación de dispersión cerca del centro del gap dinámico toma la forma

$$\bar{\varepsilon}(k_x) = \varepsilon(k_x)/\hbar\Omega \approx \hbar\Omega \frac{1}{2(1+\eta^2)} \mp \frac{\hbar\Omega\eta}{2(1+\eta^2)} \frac{k_x}{k_0}, \tag{3.26}$$

siendo la dependencia de la energía lineal en k_x , por lo que describe excitaciones electrónicas sin masa y dispersivas, localizadas en el borde.

En la Fig. 3.4 vemos que la relación de dispersión analítica está en muy buen acuerdo con los resultados numéricos para el modelo tight-binding. La solución exacta en el dominio temporal para $\varepsilon = \hbar\Omega/2$ cumple con $k_x = -\tilde{q} = -1/2\xi$, $k_y = k_0$ y toma la forma

$$\begin{aligned}
 \psi_{K,+}^B(\mathbf{r}, t) &= e^{-iy/2\xi} e^{\tilde{x}/2\xi} \frac{1}{\sqrt{2\xi L_y}} \\
 &\times \left[\begin{pmatrix} i \sin k_0 \tilde{x} \\ -\cos k_0 \tilde{x} \end{pmatrix} e^{i\Omega t} + \begin{pmatrix} \sin k_0 \tilde{x} \\ -\cos k_0 \tilde{x} - 2\eta \sin k_0 \tilde{x} \end{pmatrix} \right]. \tag{3.27}
 \end{aligned}$$

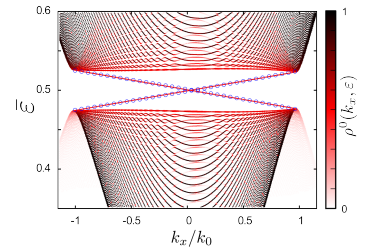


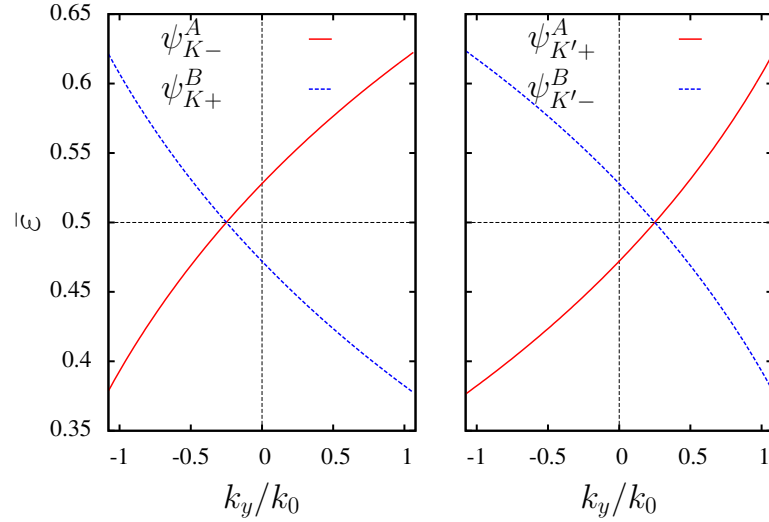
Fig. 3.4: Comparación entre las relaciones de dispersión utilizando los resultados analíticos (círculos azules) y los numéricos (puntos en escala de color) utilizando un modelo tight-binding para una cinta de $N = 1000$, $\hbar\Omega = 0,3t$ y $z = 10^{-3}$. La escala de color indica el peso sobre la réplica $n = 0$, mientras que los cálculos están realizados con 4 réplicas de Floquet. *Figura adaptada de [53].*

En la Fig. 3.5 (a) se grafican las dispersiones que son soluciones de las Ecs. (3.17) y (3.25) (más allá de la aproximación a $\varepsilon \approx \hbar\Omega/2$). Vemos que las velocidades de los estados que pertenecen a un borde $\phi_{K,-}^A(\mathbf{r})$ y al otro $\phi_{K,+}^B(\mathbf{r})$ (calculadas como $\frac{\partial\varepsilon}{\hbar\partial k_x}$ o bien como el valor medio de $\langle\langle v \rangle\rangle = v_F\langle\langle\sigma_x\rangle\rangle$), son opuestas y cumplen

$$v_{K,-}^A = -v_{K,+}^B = \frac{\eta}{1+\eta^2}v_F, \quad (3.28)$$

para energías cerca del centro del gap dinámico.

Fig. 3.5: Relación de dispersión (a) para los estados de borde en el valle K_+ y (b) para los estados en el valle K_- . La línea continua roja corresponde a la dispersión los estados localizados en el borde $y = 0$ (terminado en sitios A) y la línea de puntos azules a la dispersión de los estados localizados en el borde opuesto $y = W$ (terminado en sitios A) de una cinta zigzag muy ancha ($W \gg \xi$). Para un mismo borde, los estados en los valles K_+ y K_- se propagan en la misma dirección, siendo la velocidad opuesta en el otro borde [53].



Las soluciones para el valle K_- pueden ser fácilmente obtenidas si realizamos un reordenamiento de la base tal que el Hamiltoniano tenga la misma forma para ambos valles. En la base reordenada, las funciones de Floquet son $\phi_{K_-}(\mathbf{r}) = \{[-\bar{u}_{1B}(\mathbf{r}), \bar{u}_{1A}(\mathbf{r})], [-\bar{u}_{0B}(\mathbf{r}), \bar{u}_{0A}(\mathbf{r})]\}^T$, que equivale a aplicar el operador $i\sigma_y\tau_0$ al vector que define las funciones de onda en el valle K_+ . Por lo tanto,

$$\begin{aligned} \phi_{K,-}^A(\mathbf{r}) &= -i\sigma_y\tau_0\phi_{K,+}^B(\mathbf{r}) \\ \phi_{K,-}^B(\mathbf{r}) &= -i\sigma_y\tau_0\phi_{K,+}^A(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (3.29)$$

son las soluciones en K_- para bordes terminados en la familia de sitios A o B y dependen de las soluciones en K_+ para la familia de sitios opuesta. En particular se cumple que

$$v_{K,-}^A = v_{K,+}^B, \quad (3.30)$$

$$v_{K,-}^B = v_{K,+}^A, \quad (3.31)$$

por lo que la velocidad del estado de borde en cada valle tiene el mismo signo, y signos opuestos al cambiar de borde. En la Fig 3.5 (b) se muestra la dispersión para el valle K_- , donde vemos que las velocidades de los estados en K_+ y K_- para un mismo borde de la muestra tienen el mismo signo y en el borde opuesto el

signo opuesto, lo que hace que los estados de borde inducidos por la radiación sean *quirales*.

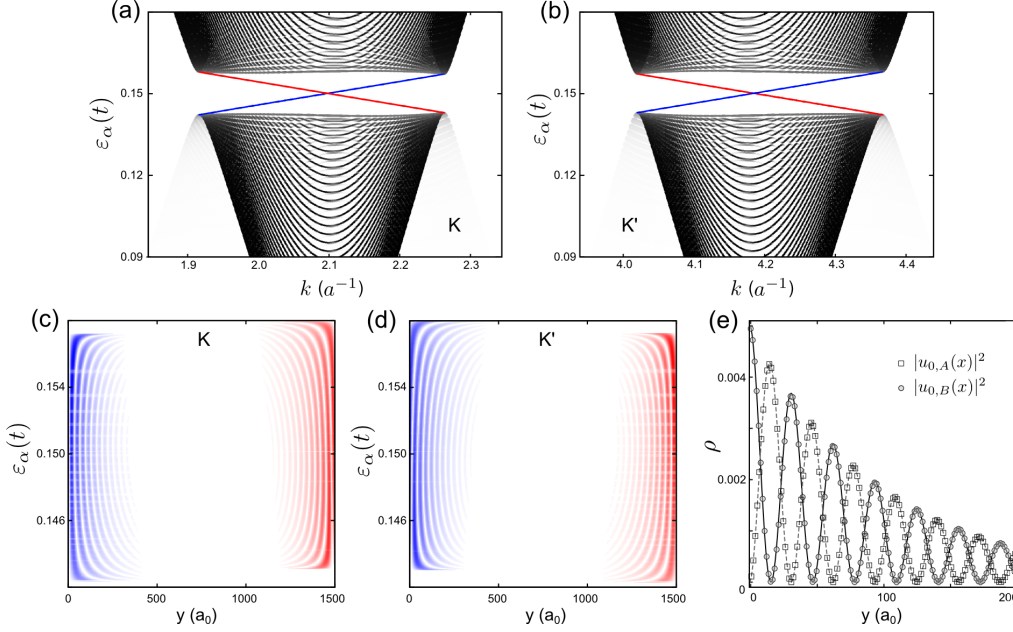


Fig. 3.6: Espectro de cuasienergías de una cinta zigzag de ancho $W = 213\text{nm}$, irradiada con luz circularmente polarizada de frecuencia $\hbar\Omega = 0,3t$, e intensidad $z = 0,05$, en el panel (a) para el valle K_+ y en el panel (b) para el valle K_- . En color se muestra el peso sobre la réplica $n = 0$ de blanco ($w^0 = 0$) a negro ($w^0 = 1$), mientras que los estados de borde se destacan en color azul (izquierda) y rojo (derecha). La distribución espacial de la densidad de probabilidad de los estados de borde sobre la subred A se muestra en (c) para K_+ y en (d) para K_- . El panel (e) muestra un corte en el mapa espacial (c) para sitios de tipo A y B (cuadrados y círculos) mientras que los resultados analíticos se muestran en líneas a tramos y continuas. *Figura adaptada de [34].*

Finalmente, podemos comparar tanto la dispersión de los estados de borde, como el decaimiento y las oscilaciones obtenidas analíticamente, con los resultados numéricos del modelo tight-binding. Recordemos que en este modelo los hoppings entre sitios dependen del tiempo de la forma

$$t_{i,j}(t) = t \exp\left(i \frac{2\pi}{\Phi_0} \int_{r_i}^{r_j} \mathbf{A}(t) d\mathbf{r}\right). \quad (3.32)$$

Para construir el Hamiltoniano de Floquet obtenemos las componentes de Fourier de estos elementos de matriz y haciendo uso de la identidad de Anger-Jacobi llegamos a

$$t_{i,j}(t) = \sum_n t_{i,j}^n e^{-in\Omega t}. \quad (3.33)$$

Las componentes de Fourier de los hoppings $t_{i,j}(t)$ pueden interpretarse como los hoppings entre distintas réplicas, tal que el elemento de matriz entre un sitio de la réplica m y un sitio vecino de la réplica $m + n$ están acoplados por $t_{i,j}^n$. Puede probarse que estos hoppings son proporcionales a z^n para intensidades bajas, donde $z = A_0 \frac{2\pi a}{\Phi_0}$ es un parámetro adimensional que controla la intensidad de la radiación. Para cualquier valor de la intensidad z puede demostrarse (ver Apéndice A.1) que son proporcionales a $J_n(z)$, que es la función de Bessel de orden n . La fase que

adquiere el hopping entre réplicas está dada por

$$t_{i,j}^n = t e^{-i\varphi_{i,j} n} J_n(z) \quad \varphi_{i,j} = \tan^{-1} \left(\frac{(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)_{\hat{y}}}{\sqrt{2}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)_{\hat{x}} - (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)_{\hat{y}}} \right), \quad (3.34)$$

donde $\varphi_{i,j}$ un factor geométrico que da información de la red y toma esa forma para polarización circular.

Con el Hamiltoniano de Floquet en forma matricial del modelo tight-binding podemos resolver espacialmente a lo largo del ancho de la cinta la densidad espacial de los estados de borde. En la Fig. 3.6 se muestran los estados de borde para el valle K_+ y K_- para una cinta zigzag de ancho $W = 213\text{nm}$, equivalente a $N = 2000$. En los paneles (a) y (b) vemos la relación de dispersión donde se distinguen las bandas del grafeno irradiado, en escala de color se indica el peso sobre la réplica $n = 0$, con puntos negros para $w^0 = 1$ y blancos para $w^0 = 0$. El peso de los estados de borde es cercano a $w^0 = 0,5$ y se distinguen con los mismos colores (azul y rojo) utilizado para mostrar la densidad espacial de los estados en (c) y (d) –sólo se muestra la densidad de probabilidad de los sitios de tipo A para destacar las oscilaciones. El estado en color azul está localizado a izquierda de la muestra, mientras que el estado de color rojo a derecha, tanto para el valle K_+ como el K_- . Las pequeñas líneas horizontales claras de los paneles (c) y (d) de la densidad espacial se corresponden a cruces evitados entre los estados de borde y las bandas de réplicas de Floquet de orden superior $n = 2, -1$. En la Fig. 3.6 (e) se muestra un corte en el mapa espacial de estados en (c) para $\varepsilon = \hbar\Omega/2$ pero mostrando las densidades para sitios de tipo A y B . Podemos comparar el decaimiento y las oscilaciones de las funciones de onda localizadas en los bordes. Las líneas indican las soluciones analíticas: para los sitios de tipo A líneas oscuras continuas y B líneas claras a trazos. Los puntos indican el peso sobre la réplica $n = 0$ de las funciones de onda obtenidas con el modelo tight-binding resuelto espacialmente, para sitios de tipo A círculos rellenos y sitios de tipo B cuadrados vacíos. Tanto el decaimiento como las oscilaciones muestran un perfecto acuerdo para energías cercanas a $\hbar\Omega/2$ ($\varepsilon = 0,15t$ en la figura).

Resultados numéricos para una muestra semi-infinita

Una forma de eliminar los efectos de tamaño finito y corroborar la quiralidad de los estados de borde es tomar la densidad local de estados (LDOS) resuelta en el momento transversal k_x cerca del borde de un plano semi-infinito de grafeno

$$\rho_{jj}(\varepsilon, k) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}(G_{jj}^0(\varepsilon + i0^+, k)), \quad (3.35)$$

y sumar sobre los sitios j entre el borde y un ancho r

$$\rho_{edge}(\varepsilon, k) = \sum_{j=1}^r \rho_{jj}(\varepsilon, k), \quad (3.36)$$

tal que satisfaga $r \gg \xi/a_0$, de modo que el peso de los estados de borde esté completamente incluido. Para simular un plano semi-infinito, tomamos el Hamiltoniano de Floquet-Bloch de una cinta de ancho N y aplicamos el proceso de decimación hacia el interior de la cinta. El algoritmo de decimación aplicado a grafeno está explicado en detalle en Calvo y col. (2013) [43] y en general se utiliza para obtener las funciones de Green o espaciales. En el caso del plano semi-infinito, simulamos una cinta muy ancha e infinita en una dirección. La invarianza traslacional en esta dirección nos permite definir el momento k . El Hamiltoniano de Bloch para una cinta de grafeno toma una estructura tridiagonal por bloques a la que podemos aplicarle el mismo algoritmo de decimación. La versión rápida de este algoritmo nos permite simular una cinta de ancho 2^M en M iteraciones, a un muy bajo costo computacional. Según la resolución de energía buscada, es suficiente con tomar entre $M = 20$ y $M = 40$ iteraciones para que la LDOS cerca de un borde no se vea influenciada por los estados del borde opuesto (notar que la cinta tendrá anchos entre $N \sim 10^6$ y $N \sim 10^{12}$) y obtenemos efectivamente la LDOS sobre el borde de un plano semi-infinito.

La densidad de estados local ahora corresponde a un solo borde y podemos distinguir la quiralidad de los estados de borde ya que la pendiente en la relación de dispersión es su velocidad ($v = -\frac{\partial \varepsilon}{\hbar \partial k}$). En la Fig. 3.7 vemos un mapa de la LDOS cerca del borde de un semiplano de grafeno irradiado con luz de polarización circular y $\hbar\Omega = 3t$, $z = 0,5$, lo que nos da una longitud característica de $\xi = 2a_0$ (tomamos $r = 50$). Estos parámetros están exagerados para denotar efectivamente que mientras que en el gap en $\varepsilon = 0$ hay un estado con velocidad positiva, en el gap dinámico $\varepsilon = \hbar\Omega/2$ vemos dos estados, uno por valle, ambos con velocidad negativa. En la Fig 3.7 es evidente que las quiralidades de los estados en uno y otro gap son opuestas. La escala de color es meramente ilustrativa ya que al tomar una densidad local de estados cerca del borde, obtenemos un valor parcial y las bandas de grafeno (zonas oscuras) y los estados de borde no pueden estar normalizados al mismo tiempo.

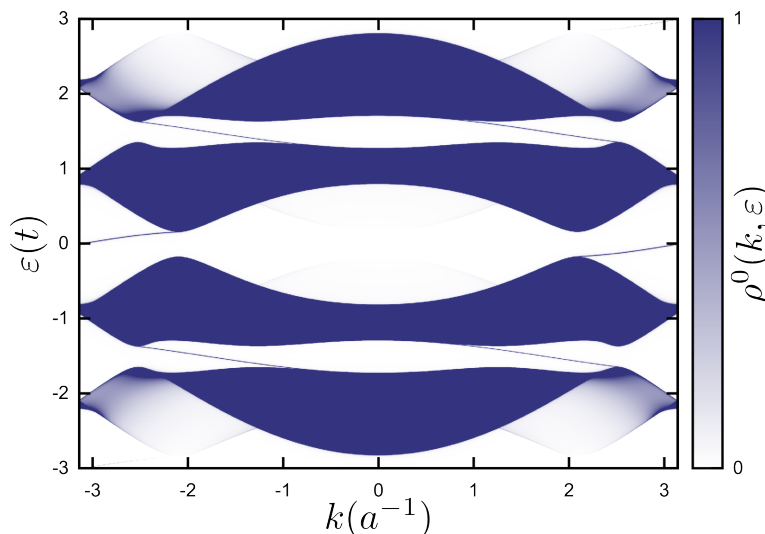
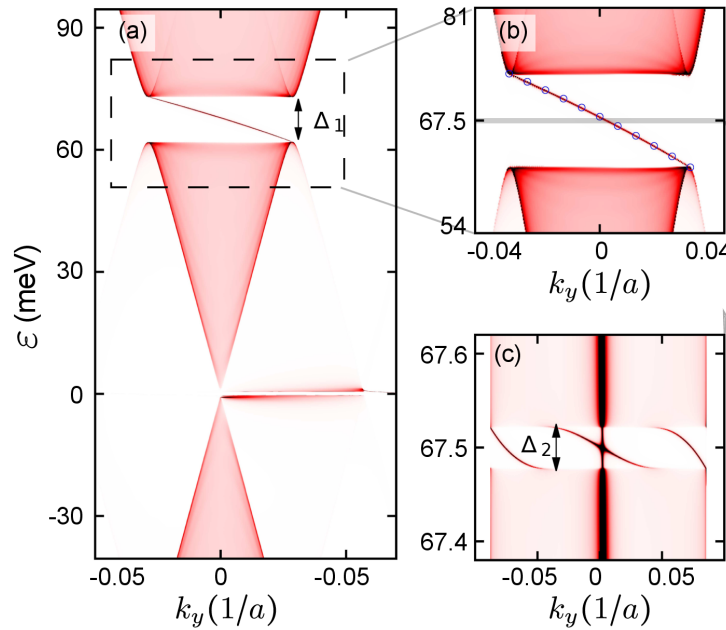


Fig. 3.7: Densidad local de estados cerca del borde de una muestra semi-infinita de grafeno irradiada con luz de frecuencia $\hbar\Omega = 3t$, intensidad $z = 0,5$ y circularmente polarizada. Se toman los primeros 50 sitios del borde para obtener el mapa de color del peso de los estados sobre la réplica $n = 0$, mientras que se consideran 5 réplicas de Floquet en el cálculo. Los estados de borde cruzan los gaps en $\varepsilon = 0$ y $\varepsilon = \pm\hbar\Omega/2$ con quiralidades opuestas. *Figura adaptada de [53].*

En la Fig. 3.8, utilizamos parámetros más realistas de radiación ($\hbar\Omega = 0,05t$ (135meV), $z = 2,8 \times 10^{-3}$) para simular un láser en el infrarrojo medio, e incluimos un 16 de réplicas de Floquet, aunque los resultados para no difieren de considerar solo 6 réplicas. En el panel (a) observamos tanto el gap dinámico Δ_1 , como el gap en $\varepsilon = 0$, aunque para estos parámetros este último es mucho más pequeño y la hibridación de los estados con las réplicas ± 1 difumina la dispersión cerca de $k_x = 0$. El gap dinámico es más robusto a los efectos de las réplicas de orden superior, por ejemplo en el panel (b) podemos ver estados de borde, en excelente acuerdo con la solución analítica (círculos azules). En el panel (c) las réplicas de orden superior también tienen un gap Δ_2 y asociado a este gap más pequeño (dos órdenes más grande en η), nuevos estados quirales aparecen con la misma quiralidad. La contribución de estos estados a la LDOS promediada en el tiempo es despreciable, aunque el hecho de que estos estados existan en el espectro de Floquet tiene importantes consecuencias sobre la topología de las bandas (ver Sección 3.3) y es tratado en detalle en el Capítulo 5.

Fig. 3.8: Densidad local de estados resuelta en k_x para parámetros más realistas de radiación. En el panel (a) se puede observar que el gap en $\varepsilon = 0$ está fuertemente modificado por las réplicas de orden superior y es mucho más chico que el gap Δ_1 en $\varepsilon \approx \hbar\Omega/2$. En el panel (b) el gap en $\varepsilon = \hbar\Omega/2$ es más robusto y está cruzado por un estado de borde (en círculos azules se muestra la solución analítica). Aumentando la precisión y la escala de la LDOS vemos en (c) que el gap de orden superior Δ_2 presenta 3 + 1 estados quirales. *Figura adaptada de [53].*



3.3. Topología de las bandas de Floquet

En esta sección dilucidamos si nos encontramos frente a estados de borde accidentales, propios de la terminación zigzag, o bien si los estados de borde son independientes de la terminación y ocurren para cualquier tipo borde. De manera similar a los aislantes topológicos estáticos, existen invariantes topológicos para los sistemas periódicos en el tiempo que nos permiten anticipar la existencia de estados de borde. Estos estados topológicos de Floquet que son dispersivos, quirales y robustos frente a defectos.

Las propiedades topológicas de los *Hamiltonianos estáticos* de sistemas de dos y tres dimensiones es un tema maduro en la física actual [23, 57, 58, 59, 60]. En dos dimensiones, el número de Chern, definido como una integral de la curvatura de Berry sobre la primera zona de Brillouin caracteriza la topología de las bandas presentes en el sistema [†]. En un sistema de dos bandas separadas por un gap, el número de Chern C_1 de la banda de menor energía caracteriza las propiedades topológicas de los estados de borde que ocurren dentro del gap. Como consecuencia de la correspondencia entre volumen y superficie, el número de Chern es equivalente al número total de estados de borde n , donde n es la suma con signo –dado por la quiralidad– de los estados de borde y coincide con la cuantización de la conductancia del sistema [21].

[†] Cabe aclarar que existen más de un invariante topológico para caracterizar distintos aspectos de un sistema físico. Además, la relevancia de la información que nos brinda el invariante topológico está relacionada con las simetrías conservadas por el Hamiltoniano del sistema [60]

En el caso de Hamiltonianos periódicos en el tiempo debemos hacer uso de un invariante topológico distinto [61, 36, 62, 63] debido principalmente a que el espectro de cuasienergías del Hamiltoniano de Floquet es periódico y no acotado. Este invariante topológico llamado *número de winding*, deducido en Rudner y col.(2013) [36], describe correctamente la topología de un sistema bidimensional de Floquet sin pedir ninguna simetría extra conservada. Una discusión más detallada sobre los invariantes en sistemas forzados periódicamente se dará en el Capítulo 5. Por el momento es suficiente con comprender que, a pesar de que el espectro de Floquet es no acotado, las propiedades topológicas y el espectro de cuasienergías efectivo de un Hamiltoniano de Floquet puede ser bien descrito utilizando un Hamiltoniano de Floquet truncado a un número M de réplicas, con el cuidado de elegir un M suficientemente grande para que todos los procesos fotónicos de interés estén incluidos. En el régimen de acople débil, es decir de intensidades bajas, el número de réplicas necesarias para dar cuenta de los efectos relevantes es $M \geq \Delta/\hbar\Omega$, donde Δ es el ancho de banda del sistema. Podemos construir entonces, un invariante topológico que de cuenta del número y quiralidad de los estados topológicos que se encuentren entre las bandas de Floquet n y la banda $(n + 1)$. El invariante topológico es $W(\varepsilon)$, el *número de winding*, definido para energías dentro del gap como la suma de los números de Chern de las bandas inferiores,

$$W(\varepsilon) = \sum_{k=1}^n C_k, \quad (3.37)$$

donde ε yace en el gap entre las bandas de Floquet n y $(n + 1)$.

De las M bandas de Floquet que se solapan dentro del rango de energías de del ancho de banda del sistema original (réplica $n = 0$), sólo algunas producen modificaciones significativas en la DOS media. En particular, si el acople entre réplicas es de orden $\eta \ll 1$, la réplica de Floquet de orden n tendrá peso sobre la DOS media de orden η^n . Vemos entonces que las correcciones más significativas pueden ser consideradas incluyendo solamente las réplicas $n = -1, 0, +1$. Las réplicas $n = -1, +1$ tienen el efecto de renormalizar los puntos de Dirac abriendo un gap de orden η^2 a energías $\varepsilon_0 = 0$, mientras que los cruces entre las réplicas $n = \pm 1$

abren un gap de orden η a energías $\varepsilon_{\pm 1/2} = \pm 1/2 \hbar \Omega$. Existen además solapamientos de réplicas de orden superior cuyas implicancias sobre la topología del sistema será consideradas en el Capítulo 5, pero que no relevantes para mediciones de cantidades medias, como la DOS media.

A bajas frecuencias ($\hbar \Omega \ll t$), tanto ε_0 como $\varepsilon_{\pm 1/2}$ yacen en el régimen de bajas energías y podemos utilizar el modelo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ para obtener los Hamiltonianos efectivos que describen al sistema a energías próximas a ε_0 y $\varepsilon_{\pm 1/2}$. Bajo la aproximación de acople débil ($\eta \ll 1$) las bandas están cuasi- degeneradas para las energías de los gaps y para regiones del espacio \mathbf{k} donde las bandas se solaparían en ausencia de radiación ($\eta = 0$). En las zonas de cuasi-degeneración se encuentra la mayor contribución al número de Chern de una banda, ya que son las zonas de mayor curvatura de Berry. Las zonas del espacio \mathbf{k} cercanas a $k = 0$ (marcado con rectángulos en la Fig. 3.2) son las zonas de donde provienen las principales contribuciones a $W(\varepsilon_0)$, el número de winding del gap a energía cero, mientras que las contribuciones a $W(\varepsilon_{1/2})$ provienen de $k = \Omega/2v_F$ (marcado con círculos en la Fig. 3.2).

Para calcular estas contribuciones al número de winding primero debemos identificar las zonas del espacio \mathbf{k} donde se abre un gap en ε , luego obtener el Hamiltoniano efectivo en esos puntos para cada valle, que es una matriz 2×2 de la forma

$$\mathcal{H}_F^{\text{eff}}(\mathbf{k}, \nu) = \mathbf{h}_{\varepsilon, \nu}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}$$

El paso siguiente es calcular la contribución al número de Chern de cada cruce y sumar las contribuciones de ambos valles, suponiendo que la curvatura de Berry decae lo suficientemente rápido fuera de estas zonas.

El Hamiltoniano efectivo que describe el gap en ε_0 está dado por

$$\mathbf{h}_{\varepsilon_0, \nu}(\mathbf{k}) = \hbar v_F (k_x, \nu k_y, \nu \eta^2 \Omega / v_F),$$

donde $\nu = \pm 1$ es el índice de valle. La contribución al número de Chern de cada valle es $1/2$ y dado que las contribuciones tienen el mismo signo, obtenemos un total de 1 estado. Para analizar el gap en $\varepsilon_{1/2}$ podemos considerar solamente las réplicas $n = 0, +1$ y expresar el Hamiltoniano de Floquet en la base de las autofunciones de \mathcal{H}_0 , el Hamiltoniano no perturbado. En esta base, el cruce entre la rama como energía positiva ($+\hbar v_F k$) de la réplica $n = 0$ y la rama con energía negativa ($\hbar \Omega - \hbar v_F k$) de la réplica $n = 1$ puede describirse con el Hamiltoniano efectivo

$$\mathbf{h}_{\varepsilon_{1/2}, \nu}(\mathbf{k}) = \hbar v_F ((k - k_0) \hat{\mathbf{k}} - k_0 \eta \hat{\boldsymbol{\xi}}_k),$$

donde $\hat{\xi}_k = \sin \theta_k \hat{\theta}_k + \cos \theta_k \hat{z}$. La contribución de este cruce al número de Chern es de -1 por cada valle, lo que nos da un total de -2 estados topológicos. Notoriamente el gap en $\varepsilon_{1/2}$ tiene el doble de estados que el gap en ε_0 y con quiralidad opuesta.

Las propiedades topológicas que deducimos a bajas energías prueban ser válidas incluso para algunos casos de altas frecuencias (ver Fig. 3.7), donde $\varepsilon_{\pm 1/2}$ yace más allá de la singularidad de van Hove para grafeno.

Cabe aclarar que sólo consideramos los cruces que generen estados topológicos con peso significativo sobre la réplica $n = 0$. Podemos anticipar, por la periodicidad del espectro de Floquet y por la simetría electrón-hueco del grafeno, que el peso de los estados topológicos exactamente en el centro del gap, será igual al promedio de los pesos de las réplicas de Floquet. Por ejemplo, el gap en ε_0 es originado por una renormalización de orden η^2 de las bandas de la réplica $n = 0$, o bien podríamos pensarlo como un cruce de dos bandas pertenecientes a la réplica $n = 0$, en cualquier caso podemos anticipar que el peso espectral del estado topológico sobre la réplica cero es $w^0 = 1 - \mathcal{O}(\eta^2)$. En cambio, en el gap en $\varepsilon_{1/2}$ el cruce es entre la réplica $n = 0$ y la réplica $n = 1$ y las simetrías del espectro nos aseguran que exactamente a energía $\hbar\Omega/2$ el peso de los estados topológicos generados debe ser $w^0 = 1/2 - \mathcal{O}(\eta)$.

En la Fig. 3.1 vimos cómo los estados en $\varepsilon_{1/2}$ tienen peso $w^0 = 1/2$ (en color rojo), mientras que los estados topológicos que ocurren en ε_0 no llegan a desarrollarse ya que se encuentran fuertemente afectados por los efectos de tamaño finito (el gap es más pequeño) y por los acoples con las réplicas de orden superior.

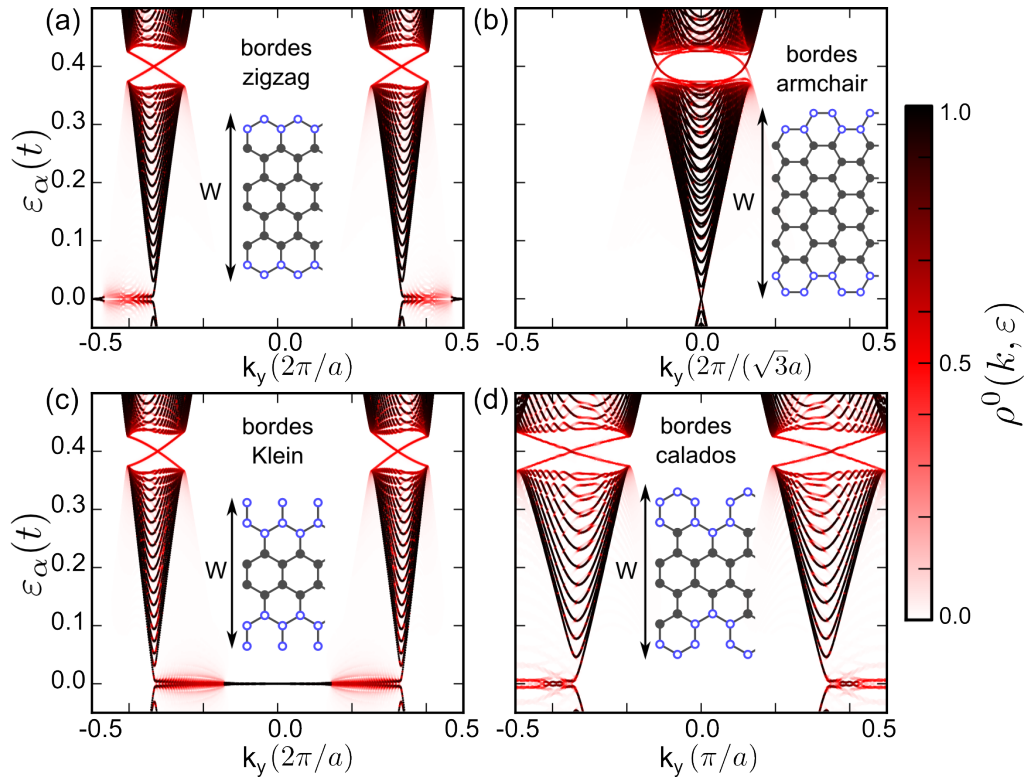
3.3.1. Distintos tipos de borde

En la sección anterior vimos que el número y la quiralidad del total de estados de borde está caracterizado por un invariante topológico: el número de winding. Al igual que el número de Chern en aislantes topológicos en equilibrio, la correspondencia volumen-superficie [21] asegura que los estados de borde aparecen independientemente de la terminación de la muestra de grafeno.

Los estados topológicos de Floquet que emergen dentro del gap dinámico, además de ser robustos frente al desorden estructural, también deben aparecer en el borde de una muestra de grafeno irradiada, para cualquier dirección del borde dentro de la red de grafeno y sin importar los detalles de la terminación del borde. En la Fig. 3.9 se muestran algunos casos típicos de bordes que aparecen en las muestras de grafeno. En el panel (a) se muestra una cinta con bordes zigzag como referencia, en el panel (b) una cinta armchair, en el panel (c) una cinta zigzag con bordes de tipo Klein [64] y en el panel (d) una cinta zigzag con bordes calados (*cove edges*) [65].

Los distintos tipos de borde cambian la proyección de la relación de dispersión, es decir cómo se pliega la zona de Brillouin y también puede cambiar los detalles de la dispersión de los estados topológicos. Sin embargo su número total y quiralidad permanecen invariantes. En los paneles (a), (c) y (d) se pueden distinguir los valles

Fig. 3.9: Espectro de cuasienergías para cintas de grafeno con distintas terminaciones, irradiadas con luz circularmente polarizada de frecuencia $\hbar\Omega = 0,8t$ e intensidad $z = 0,04$. En color se muestra la contribución a la densidad de estados promediada en el tiempo que es la proyección sobre la réplica $n = 0$ (en los cálculos se incluyen desde la réplica $n = -2$ a la $n = +2$). En los paneles (a), (c) y (d) se muestran los resultados para cintas zigzag de ancho $W = 31,95\text{nm}$ con bordes zigzag, bordes de tipo Klein y bordes calados, respectivamente; y en el panel (b) los resultados para una cinta armchair de ancho $W = 31,48\text{nm}$. *Figura adaptada de [53].*



K_+ y K_- , que alojan un estado de borde cada uno; mientras que para una cinta armchair (b) ambos conos están plegados sobre el mismo punto ($k_x = 0$) y los estados de borde se ubican cerca del borde de banda

Podemos verificar que en todos los casos dos estados cruzan el gap dinámico, un estado por valle K_{\pm} . El gap en $\varepsilon = 0$ es mucho más pequeño para los parámetros elegidos y esto, junto a los efectos de tamaño finito de las cintas de grafeno, hacen que no se desarrolle el estado de borde. Vemos en la Fig. 3.9 que los detalles del borde sí cambian la relación de dispersión, pero no el número efectivo de canales de conducción. El número de estados de borde dispersivos junto a la quiralidad están dados por el invariante topológico.

3.3.2. Robustez del transporte frente a defectos

Para mostrar numéricamente la quiralidad y la robustez del transporte frente a los defectos en la red podemos calcular la probabilidad total de transmisión entre dos sitios (s_1, s_2) de la muestra irradiada, separados por una distancia $d = 63\text{nm}$ a lo largo de la dirección x , que equivale a una distancia de 512 celdas unidad de una cinta zigzag. La probabilidad de transmisión está dada entre dos cables de prueba virtuales, débilmente acoplados a los sitios s_1 y s_2 † y para verificar la quiralidad de los estados, fijamos el sitio s_1 en la capa L a izquierda, cerca del borde de la muestra, mientras que variamos la ubicación transversal (coordenada y) del sitio s_2 en la capa R (a derecha).

En la figura 3.10 se muestra la probabilidad de transmisión $T_{s_1 \rightarrow s_2}$ en azul y $T_{s_2 \rightarrow s_1}$. La marcada asimetría de la probabilidad de transmisión verifica la quiralidad

† Los detalles de los cables no son relevantes en el límite de acople débil, aunque sí es importante que los cables no estén irradiados para que las ocupaciones electrónicas en los cables estén bien definidas[66] y los procesos de disipación ocurran en ellos.

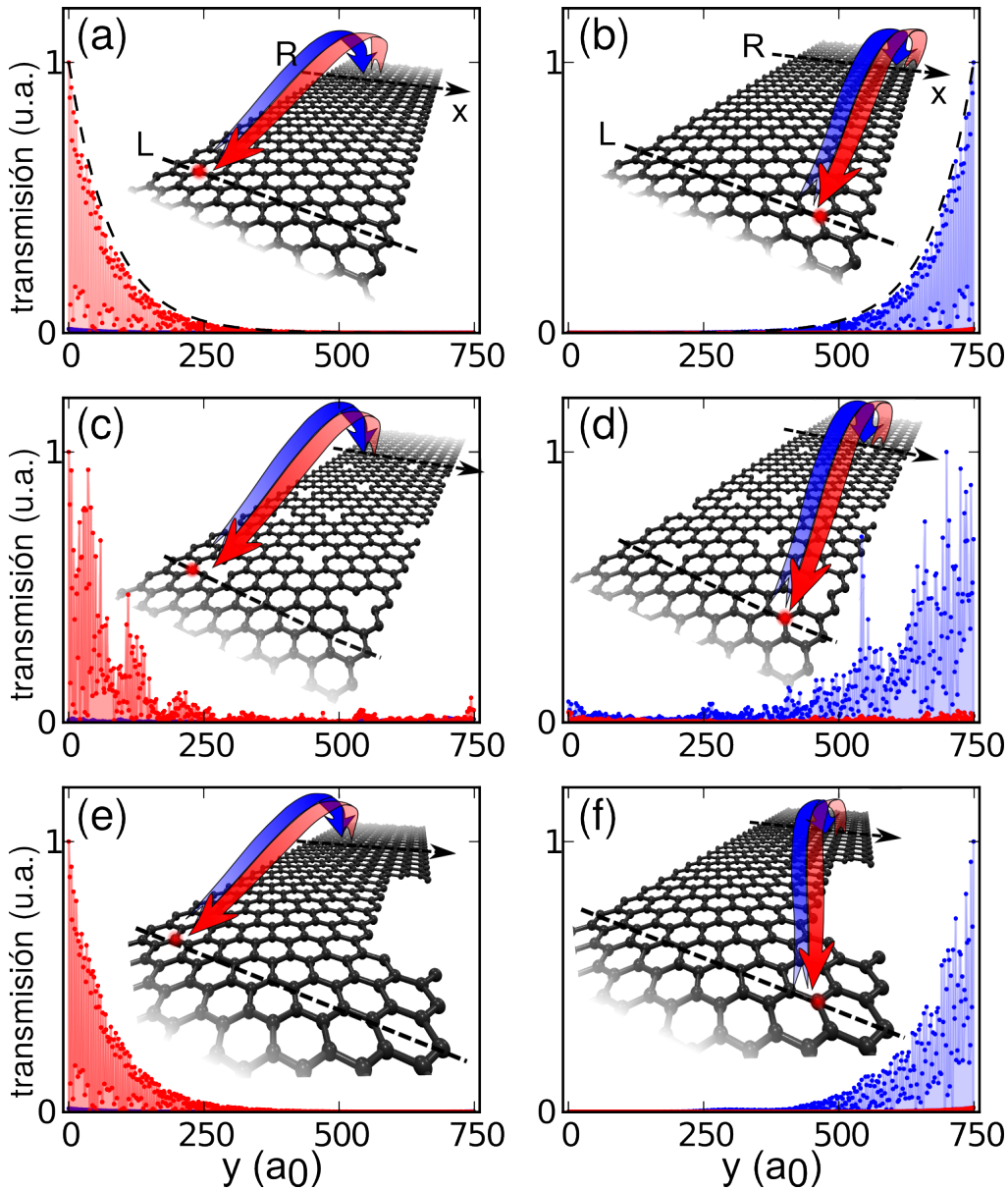


Fig. 3.10: Distribución espacial de la probabilidad de transmisión local entre dos sitios (s_1, s_2) ubicados en las capas L y R de una cinta de grafeno irradiado con luz de polarización circular, frecuencia $\hbar\Omega = 2,7\text{eV}$ y acople $\eta = 3/16$, a un nivel de Fermi cercano al gap dinámico $\varepsilon = 0,497\hbar\Omega$. Ambas capas están separadas por 63nm , como se denota en líneas de puntos en los paneles. El sitio s_1 se ubica en el segundo átomo desde la izquierda (paneles (a), (c) y (e)); y el sitio s_2 en el segundo átomo desde la derecha (paneles (b), (d) y (f)). La coordenada y entre es la posición del sitio s_2 en la capa R y recorre el ancho de la cinta $750 a_0$, siendo a_0 la distancia interatómica. Se muestran las probabilidades de transmisión $T_{s_1 \rightarrow s_2}$ en azul y $T_{s_1 \rightarrow s_2}$ en rojo, normalizadas a su valor máximo. Los paneles (a) y (b) corresponden a una muestra sin defectos, los paneles (c) y (d) muestran los resultados cuando se introduce un $0,1\%$ de vacancias entre las capas L y R y en los paneles (e) y (f) se cortó un pequeño trozo de 2 nm de ancho y $15,7\text{ nm}$ de largo del borde derecho. Figura adaptada de [34].

de los estados. En los paneles (a) y (b) la muestra de grafeno está libre de defectos y podemos observar cómo la probabilidad de transmisión decae exponencialmente a una tasa $1/\eta$ (líneas negras a trazos), siguiendo el comportamiento de la LDOS media de los estados de borde. Mientras que en el panel (a) el estado localizado cerca del borde $y = 0 a_0$ se propaga desde la capa R hacia la L (puntos rojos), en el panel (b) el estado localizado cerca del borde $y = 750 a_0$ tiene velocidad opuesta y se propaga desde la capa L hacia la R (puntos azules).

El desorden en un material conductor, tiende a disminuir la conductancia y a producir efectos de retrodispersión. En cambio en estados conductores quirales, los estados con direcciones de propagación opuestas se encuentran separados espacialmente, lo que hace que sean robustos frente a muchos tipos de defectos. En los paneles (c) y (d) de la Fig. 3.10, verificamos que los estados son robustos frente al desorden estructural. Entre las capas L y R introducimos un $0,1\%$ de vacancias

que, más allá de que inducen dispersión de un borde a otro, los estados inducidos por radiación mantienen sus propiedades quirales de transporte en un alto grado. Otro tipo de defecto se muestra en los paneles (e) y (f), donde una franja de 2 nm de ancho y 15,7 nm de largo fue cortada del borde derecho de la muestra entre las capas L y R . En el panel (e), el perfil de transmisión local es prácticamente idéntico a la cinta sin defectos del panel (a), por lo que el estado en el borde $y = 0$ a_0 no se ve afectado por las modificaciones que se hagan en el borde opuesto. En el panel (f), el perfil de transmisión se ve levemente afectado pero mantiene sus propiedades quirales de transporte. Esto demuestra que los estados de borde se comportan como canales unidireccionales de transporte, quirales y robustos frente a defectos.

3.4. Contribuciones originales

- Desarrollo de códigos propios para obtener resultados espectrales y resolución espacial en el espacio real de los aislantes topológicos de Floquet, tanto para cintas de grafeno como para muestras semi-infinitas.
- Describimos analíticamente la aparición de estados de borde de Floquet en una muestra de grafeno irradiada de terminación zigzag. Junto con la forma explícita de la función de onda para cada subred A y B y para cada valle K_+ y K_- pudimos deducir la longitud de localización, la velocidad y la relación de dispersión de los estados. Notoriamente vemos oscilaciones en la densidad de probabilidad de los estados de borde y que su velocidad es independiente de la velocidad de Fermi en grafeno.
- Verificamos numéricamente la existencia de los estados topológicos de Floquet en un modelo de red, en muy buen acuerdo con los resultados analíticos. También este modelo de red nos permite comprobar la quiralidad de los estados de borde mediante un cálculo (local) de transporte.
- Todos estos resultados están soportados por el cálculo de las propiedades topológicas de las bandas de Floquet del grafeno irradiado. Verificamos que los estados de borde en cintas de distintos tipos de terminaciones coinciden en número y quiralidad con el número de winding.

CAPÍTULO 4

PROPIEDADES DE TRANSPORTE DE LOS AISLANTES TOPOLÓGICOS DE FLOQUET

Contenidos

4.1. Transporte a dos terminales	51
4.1.1. Mismatch de los modos electrónicos	53
4.2. Transporte multiterminal	54
4.2.1. Plateaus de conductancia Hall	57
4.3. Contribuciones originales	58

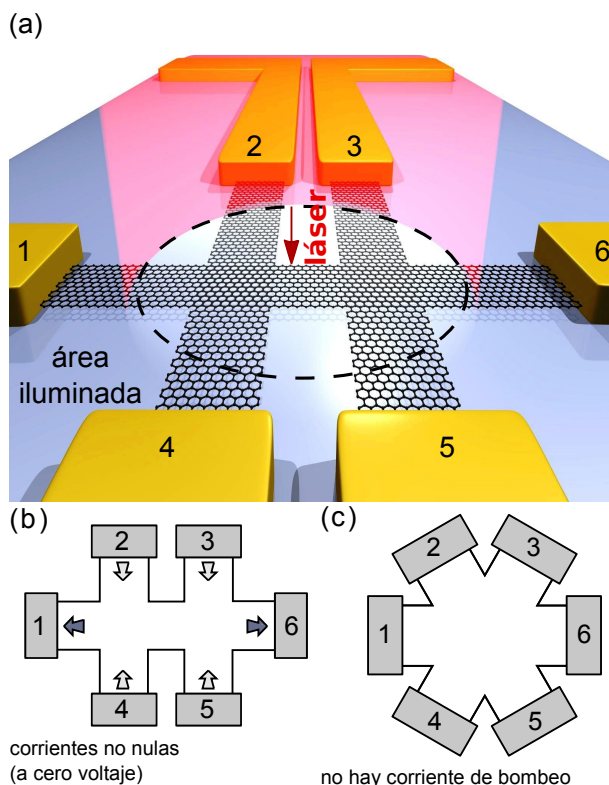
Abstract

La característica más distintiva de los aislantes topológicos es la cuantización de los plateaus Hall de conductancia. Esta cuantización está dada por el número y quiralidad de los estados de borde cuya presencia se deduce de las propiedades topológicas del bulk. En cambio, para los aislantes topológicos de Floquet, los plateaus de conductancia no están cuantizados en exactamente el total de estados de borde. A diferencia del caso estático, sólo los estados topológicos que suman al promedio temporal de la densidad de estados son los que contribuyen a la magnitud de la conductancia. Utilizando un esquema de scattering con una muestra de grafeno irradiada conectada a cables no irradiados mostramos que la cuantización de la conductancia Hall no está directamente relacionada al invariante topológico de las bandas de Floquet.

Los aislantes topológicos de Floquet son sistemas en los que las propiedades topológicas son inducidas por un potencial periódico en el tiempo. La luz circularmente polarizada irradiada sobre grafeno abre gaps en el punto de Dirac y el gap *dinámico* (ver Sección 3.3). Estos gaps son no triviales y alojan estados topológicos de borde de no equilibrio, lo que los diferencia de los estados topológicos que ocurren en los aislantes topológicos en sistemas estáticos y en equilibrio. En los sistemas de Floquet, los estados son de no equilibrio lo cual pone dificultades en determinar la ocupación de los estados. Los argumentos termodinámicos que definen la función de ocupación $f(\varepsilon)$ de los estados en sistemas de equilibrio no puede aplicarse al formalismo de estados de Floquet directamente [67], ya que el espectro de Floquet es no acotado. Si consideramos un sistema cerrado con

un potencial dependiente periódicamente del tiempo, la temperatura del sistema puede tender a infinito [68], aunque puede probarse que el sistema se estabiliza si tenemos en cuenta la localización de estados de muchos cuerpos [69]. Uno de los caminos para determinar la ocupación de los estados de Floquet es conectar el sistema a reservorios térmicos [70] relevantes, que pueden ser: electrón-fonón, recombinación radiativa, emisión de fotones, scattering asistido por fotones, etc. Según qué mecanismos sean tenidos en cuenta, los baños con reservorios térmicos, y la configuración de acople entre el sistema forzado y el baño electrónico [71, 72], será el estado estacionario al que llega el sistema y este estado define las propiedades de transporte del sistema. Otra punto de vista a considerar es cuáles son los estados de Floquet accesibles según el estado inicial del sistema y el protocolo de encendido del potencial periódico –aunque en presencia de no-integrabilidad e interacciones el estado estacionario a tiempos largos es independiente del estado inicial [73]. Estas cuestiones siguen siendo tema activo de investigación y algunas propuestas pueden encontrarse en las Refs. [38, 74, 75, 76, 77, 78, 79].

Fig. 4.1: Esquema utilizado en los cálculos de transporte. (a) Un láser ilumina el centro de una región de scattering conectada a cables no irradiados. (b) La configuración multiterminal en forma de «H» permite corrientes de bombeo ya que los cables son no equivalentes. Las terminales 1 y 6 tienen bordes de tipo zigzag, mientras que las terminales 2 a 5 tienen bordes armchair. (c) Cuando los cables son equivalentes entre sí el bombeo de corriente es nulo. *Figura adaptada de [80].*



Una situación física donde podemos definir las ocupaciones de un aislante topológico de Floquet, como el grafeno irradiado, es cuando la inyección y extracción de carga se hace mediante cables no irradiados y la región irradiada o de scattering es lo suficientemente pequeña para que no ocurran mecanismos de disipación al interior de la región. En este esquema, podemos usar el formalismo de scattering de Floquet, que ha sido claramente mostrado como equivalente al formalismo de Keldysh [52] para obtener las propiedades de transporte. Las ocupaciones están definidas en los cables y también allí ocurren los procesos de disipación [81,

82, 66]. En la Fig. 4.1 (a) se esquematiza una muestra de grafeno irradiado que está conectada a cables no irradiados en una configuración multiterminal. En una configuración multiterminal la corriente media sobre la terminal α , es el promedio temporal $\bar{I}_\alpha = \frac{1}{T} \int_0^T I_\alpha(t) dt$ y toma la forma [81]:

$$\bar{I}_\alpha = \frac{2e}{h} \sum_{\beta \neq \alpha} \sum_n \int \left[\mathcal{T}_{\beta,\alpha}^{(n)}(\varepsilon) f_\alpha(\varepsilon) - \mathcal{T}_{\alpha,\beta}^{(n)}(\varepsilon) f_\beta(\varepsilon) \right] d\varepsilon, \quad (4.1)$$

donde $\mathcal{T}_{\beta,\alpha}^{(n)}(\varepsilon)$ es la probabilidad de transmisión del cable α al β para un electrón que absorba n fotones (emita $|n|$ fotones si $n < 0$) y $f_\alpha(\varepsilon)$ es la función de Fermi en el cable α .

La conductancia diferencial se obtiene al expandir linealmente la Ec. (4.1) en los voltajes de bias, aunque al estar rota la simetría de reversión temporal, no podemos asumir que las probabilidades de transmisión $\mathcal{T}_{\alpha,\beta}$ y $\mathcal{T}_{\beta,\alpha}$ sean iguales. Esta desigualdad se extiende a la suma $\sum_\beta \mathcal{T}_{\beta,\alpha}(\varepsilon) \neq \sum_\beta \mathcal{T}_{\alpha,\beta}(\varepsilon)$ lo que significa que en ausencia de voltaje existe una corriente efectiva de bombeo entre las terminales como se muestra en el esquema de la Fig. 4.1 (b). El término de bombeo debemos considerarlo en los cálculos de conductancia a multiterminal, aunque para simplificar los cálculos utilizamos una configuración hexagonal (Fig. 4.1 (c)) para que por simetría el bombeo de carga se anule.

En este Capítulo mostraremos los resultados presentados en «Multiterminal Conductance of a Floquet Topological Insulator» (Foa Torres, Perez-Piskunow, Balseiro y Usaj [80]), para el cual el autor de ésta tesis ha contribuido con los resultados preliminares de conductancia a dos terminales, en la explicación del empalme imperfecto entre los modos electrónicos de los cables y de la muestra y en discusiones sobre todo el trabajo.

4.1. Cálculos de transporte a dos terminales

En la configuración de sólo dos terminales L y R , exigimos no acumulación de carga (o unitariedad) por lo que $\bar{I}_L = -\bar{I}_R = \bar{I}$ y reescribimos la Eq. 4.1 en términos de el promedio $\mathcal{T}(\varepsilon) = (\mathcal{T}_{R,L}(\varepsilon) + \mathcal{T}_{L,R}(\varepsilon))/2$ y la diferencia $\delta\mathcal{T}(\varepsilon) = (\mathcal{T}_{R,L}(\varepsilon) - \mathcal{T}_{L,R}(\varepsilon))/2$, como

$$\bar{I} = \frac{2e}{h} \int [\mathcal{T}(\varepsilon)(f_L(\varepsilon) - f_R(\varepsilon)) + \delta\mathcal{T}(\varepsilon)(f_L(\varepsilon) + f_R(\varepsilon))] d\varepsilon. \quad (4.2)$$

Expandiendo a orden lineal en el voltaje V obtenemos

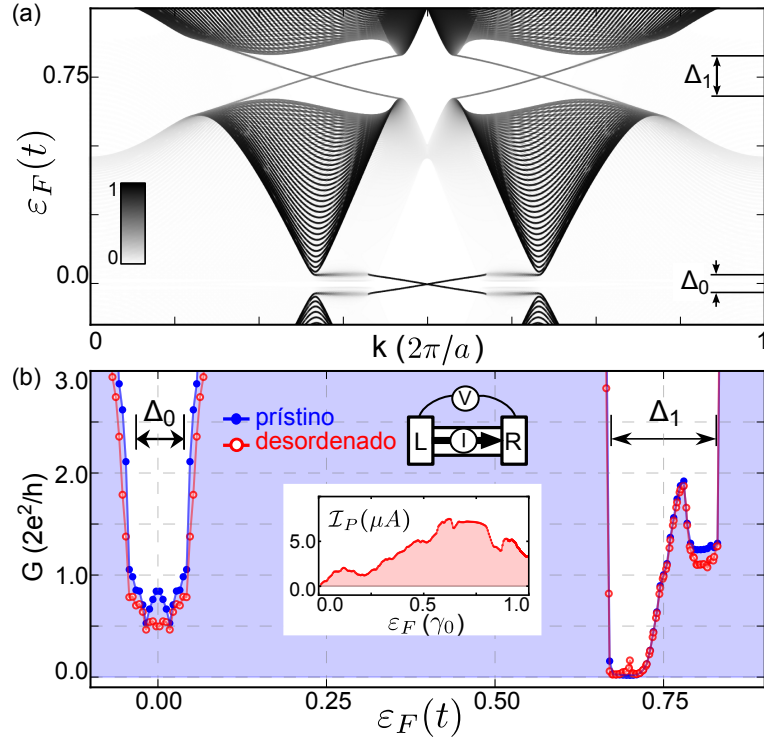
$$\bar{I} \approx \frac{2e^2}{h} \mathcal{T}(\varepsilon_F) \times V + \frac{e^2}{h} \int \delta\mathcal{T}(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (4.3)$$

donde el segundo término es la corriente de bombeo (\bar{I}_P) que no depende del voltaje y la conductancia diferencial queda como $(2e^2/h)\mathcal{T}(\varepsilon)$.

Los cálculos numéricos fueron realizados con un código construido sobre la base en el módulo Kwant [83], mientras que los resultados a dos terminales fueron comparados con los resultados de otros códigos hechos en casa en lenguaje Fortran.

Para simular la conductancia a dos terminales utilizamos la descripción atómica del modelo tight-binding de una cinta zigzag de grafeno irradiado conectado a cables no irradiados semi-infinitos a izquierda L y a derecha R , todos del mismo ancho. Los resultados se muestran en la Fig. 4.2, donde en el panel (a) vemos la dispersión de cuasienergías en escala de color que indica la contribución de los estados a la DOS promedio, es decir el peso de los estados sobre la réplica $n = 0$, siendo blanco cuando la proyección es nula ($w^0 = 0$) y negro cuando la proyección es unidad ($w^0 = 1$). En esta figura vemos la apertura de gaps en el punto de Dirac (Δ_0) a energía $\varepsilon = 0$ y el gap dinámico (Δ_1) a energía $\varepsilon = \hbar\Omega/2$. Estos gaps se reflejan en el panel (b), donde la disminución de la conductancia dentro de los gaps hasta conductancias del orden de un cuanto de conductancia $G_0 = 2e^2/h$.

Fig. 4.2: En el panel (a) la relación de dispersión efectiva para una cinta de grafeno zigzag de ancho $W = 125a$ irradiada con luz circularmente polarizada de frecuencia $\hbar\Omega = 1,5t$ e intensidad $z = 0,15$. En escala de grises se denota el peso (de blanco para $w^0 = 0$ a negro para $w^0 = 1$) sobre la DOS promedio. En el panel (b) la conductancia a dos terminales para una muestra de grafeno irradiada de largo $L = 420a$ conectada a cables de grafeno del mismo ancho que en (a). Las líneas con círculos rellenos azules corresponden a los resultados para una muestra sin defectos y las líneas con círculos vacíos rojos corresponden a los cálculos cuando la zona irradiada tiene 15 defectos (vacancias) distribuidas aleatoriamente. En este último caso, el rompimiento de la simetría de inversión induce bombeo de corriente como se muestra en el recuadro [80].



Los estados topológicos dan las propiedades de transporte dentro de los gaps y podemos ver que esta conductancia *no* está cuantizada y muestra una fuerte modulación. La conductancia dentro del gap del punto de Dirac oscila entre $0,5 G_0$ y $1,0 G_0$, siendo máxima cerca de $\varepsilon = 0$. En particular dentro del gap dinámico la conductancia pasa de $G \approx 0 G_0$ hasta $G \approx 2 G_0$ a medida que incrementamos la energía de Fermi desde $\varepsilon_F < \hbar\Omega/2$ a $\varepsilon_F > \hbar\Omega/2$. Es necesario explicar por qué prácticamente la conductancia se anula dentro del gap dinámico, siendo que existen estados conductores quirales dentro de todo el ancho Δ_1 . En la Subsección 4.1.1 se mostrará que se debe a un efecto de desempalme o *mismatch*.

En Fig. 4.2 (b) se muestran los resultados para una muestra sin defectos en círculos llenos azules y para una muestra con 15 vacancias distribuidas al azar en el interior de la muestra en círculos vacíos rojos, siendo ambos resultados cualitativamente similares. Debemos notar que si los cables y la muestra son perfectamente simétricos, la simetría de inversión asegura que L y R son indistinguibles por lo que $\delta\mathcal{T} = 0$ y no hay corriente de bombeo. Sin embargo, en una configuración realista, cualquier defecto estructural o diferencias en el empalme entre los cables y la muestra, romperían la simetría de inversión. En el recuadro de la Fig. 4.2 (b) vemos la corriente de bombeo para el sistema con defectos.

4.1.1. Mismatch entre los modos electrónicos de los cables y de la muestra

La supresión de la conductancia en el gap dinámico y su fuerte modulación se observa tanto para el transporte a dos terminales (Fig. 4.2 (b)), como para la conductancia calculada en la configuración multiterminal (ver Fig. 4.7 (a) en la Sección 4.2). Este efecto *no* se debe a la falta de estados conductores, como podemos observar en la relación de dispersión efectiva en la Fig. 4.2 (a). Tanto a energías mayores a $\hbar\Omega/2 = 0,75t$ como a energías menores existen estados quirales, conductores y localizados en los bordes.

En la Fig. 4.3 se muestra la densidad local de estados a energías (a) $\varepsilon = 0,7t < \hbar\Omega/2$ y (b) $\varepsilon = 0,8t > \hbar\Omega/2$, en la configuración multiterminal, de una muestra de grafeno irradiado, conectado a cables no irradiados. Podemos ver que tanto en el panel (a) como en el (b) existen modos extendidos en los cables, mientras que en la muestra irradiada se observa el gap bulk y los estados de topológicos que circulan por los bordes. En cambio, podemos encontrar la explicación a la supresión de la conductancia en el empalme entre los modos propagantes disponibles en los cables y los modos conductores al interior de la muestra irradiada, es decir, los estados topológicos de borde.

Para explicar la supresión de la conductancia, supongamos un esquema como el mostrado en la Fig. 4.4, donde el cable no irradiado se encuentra a izquierda y la muestra irradiada a derecha, por lo que en una configuración de scattering, estamos interesados en los modos propagantes de los cables de izquierda a derecha. Los modos entrantes en los cables pertenecen completamente a la réplica $n = 0$ ($w^0 = 1$ ya que no son modos excitados por la radiación) y se acoplan a los modos topológicos dentro de la muestra. La magnitud del acople estará dado por el peso de los estados sobre la réplica $n = 0$ y su pseudoespín. Debido a la textura de pseudoespín del grafeno, podemos asegurar que los modos que se mueven hacia la derecha en los cables se encuentran polarizados en pseudoespín. La proyección de $\langle\sigma_y\rangle$ en el valle K es negativa, mientras que la proyección en el valle K' es positiva. Ya que la muestra y el cable están perfectamente conectados y la radiación es encendida suavemente a lo largo de una longitud de $30a$, no se producen saltos

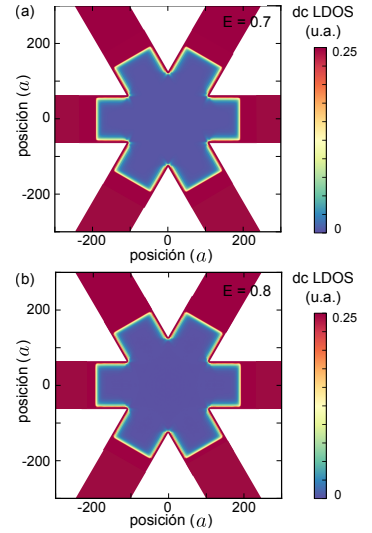


Fig. 4.3: Densidad local de estados promedio para energías (a) $\varepsilon = 0,7t$ y (b) $\varepsilon = 0,8t$. La muestra está irradiada con luz circularmente polarizada de frecuencia $\hbar\Omega = 1,5t$ e intensidad $z = 0,15$ [80].

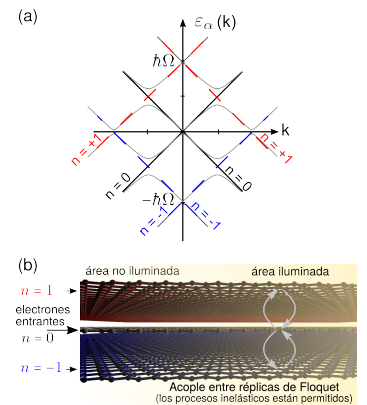
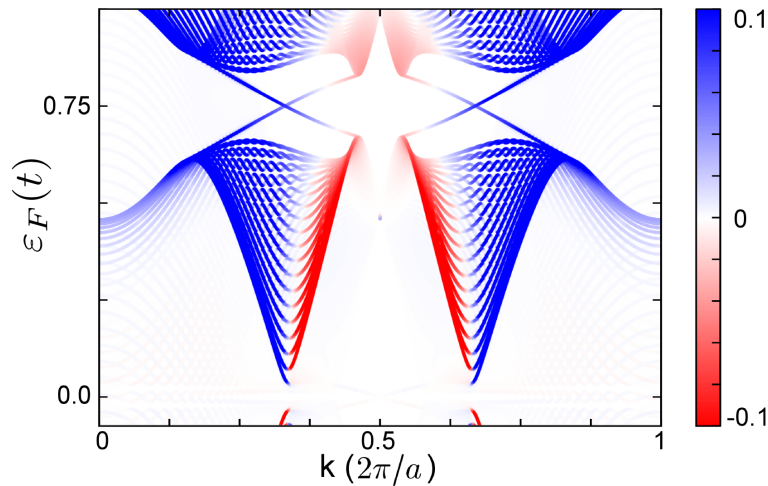


Fig. 4.4: Esquema que representa el formalismo de Floquet aplicado a una configuración de scattering. A izquierda los cables no irradiados (intensidad cero) impiden transiciones entre distintas réplicas, mientras que a la derecha la radiación induce transiciones electrónicas. [80].

grandes en el vector de onda k_x (la dirección de propagación) cuando el modo electrónico pasa desde el cable hacia la zona irradiada.

A diferencia de los modos dentro del cable no irradiado, los estados conductores dentro de la zona irradiada siguen una textura de pseudoespín como la mostrada en la Fig. 4.5, donde la textura de pseudoespín ya no está ligada a la dirección de propagación. De hecho, el pseudoespín sigue ligado a la dirección de \mathbf{k} proyectado sobre k_x , aunque ahora, el valor de k_x ya no refleja la dirección de propagación. A energías mayores a $\hbar\Omega/2$ los modos que se propagan a derecha (rojos en el valle K y azules en el valle K') tienen una proyección de pseudoespín que coincide con la proyección sobre $\langle\sigma_y\rangle$ de los estados de borde dentro de la zona irradiada. En cambio, a energías menores a $\hbar\Omega/2$, la proyección de pseudoespín los modos propagantes hacia la derecha del cable es opuesta a la proyección de pseudoespín de los estados con velocidad positiva de la muestra irradiada. Esto hace que el empalme entre los modos sea nulo y consecuentemente los modos de los cables no pueden entrar a la muestra. Esto da origen a la supresión de la conductancia observada dentro del gap dinámico.

Fig. 4.5: Relación de dispersión para una zGNR irradiada con luz circularmente polarizada de frecuencia $\hbar\Omega =$, e intensidad $z =$. En escala de color se muestra la proyección sobre la réplica $n = 0$ de $\langle\sigma_y\rangle$ para cada estado. La escala está saturada a un valor máximo de $\pm 0,1$ para resaltar el cambio en la dirección del pseudoespín [80].



4.2. Cálculos de transporte multiterminal

Obtenemos la conductancia diferencial en un sistema multiterminal mediante el cálculo de las transmitancias entre dos terminales por los que pasa corriente, mientras que las otras terminales juegan el rol de electrodos de un voltímetro ideal. Debemos asegurar que los «electrodos» que conectamos a la muestra no inyecten ni extraigan corriente. Los voltímetros ideales constan de electrodos que son reservorios de electrones que ajustan sus parámetros internos (como el potencial químico μ_α^0) para asegurar que no haya corriente neta sobre la terminal α –es posible que los voltímetros tengan que ejercer trabajo sobre el sistema para asegurar esto. Sin embargo, aun puede existir una corriente de bombeo en los terminales por los que pasa la corriente. Partiendo de esta premisa podemos reescribir la Ec. (4.1)

para pequeñas desviaciones $\delta\mu_\alpha \equiv \mu_\alpha - \mu_\alpha^{(0)}$

$$\bar{I}_\alpha = \mathcal{I}_{P\alpha} + \frac{2e}{h} \sum_{\beta \neq \alpha} [\mathcal{T}_{\beta,\alpha}(\varepsilon_F) \delta\mu_\alpha - \mathcal{T}_{\alpha,\beta}(\varepsilon_F) \delta\mu_\beta], \quad (4.4)$$

donde la corriente de bombeo $\mathcal{I}_{P\alpha}$ es nula en los voltímetros. Luego aplicamos una pequeña diferencia de voltaje entre las terminales de los cables por donde pasa corriente mientras pedimos que la corriente media (o corriente *dc*) sea nula en los electrodos de los voltímetros. Las desviaciones del potencial químico $\delta\mu_\alpha$ obtenidas en este proceso determinan la conductancia Hall del sistema que, aunque haya corrientes de bombeo remanentes, no afectan la conductancia diferencial.

En un esquema de transporte multiterminal, ya no es suficiente pedir simetría de inversión para asegurar que la corriente de bombeo sea nula cuando la diferencia de voltaje es cero. En particular en una configuración de «H», como la mostrada en la Fig. 4.1 (b), la simetría de inversión (respecto de los ejes de simetría de la muestra, es decir el eje horizontal y vertical que atraviesan el centro de la muestra), nos asegura que las corrientes $\bar{I}_1 = \bar{I}_6$, que $\bar{I}_2 = \bar{I}_5$ y que $\bar{I}_3 = \bar{I}_4$ y no significa que deban ser nulas. Podemos por ejemplo tener corrientes distintas de cero, entrando por las terminales 2 a 5 y saliendo por las terminales 1 y 6, incluso a sin diferencia de voltaje. En la Fig. 4.6 podemos ver las corrientes en los cables 1 en azul, 2 en rojo y 3 en verde para una muestra irradiada conectada a cables en la configuración de forma de «H». La principal diferencia entre los cables conectados es que las terminales 1 y 6 son cintas de grafeno zigzag, mientras que los cables de las terminales 2 a 5 son cintas de tipo armchair. Esto da como resultado diferencias en los coeficientes de transmisión $\delta\mathcal{T}_j(\varepsilon) = \sum_i (\mathcal{T}_{i,j}(\varepsilon) - \mathcal{T}_{j,i}(\varepsilon))$, como se muestra en el recuadro de la Fig. 4.6 con el mismo código de color. Podemos notar que los cables 2 y 3 al ser similares entre ellos tienen perfiles de corriente de bombeo similares y que su suma es $\bar{I}_2 + \bar{I}_3 = -\bar{I}_1$, lo que asegura que no haya carga acumulada.

Queremos asegurar que la corriente de bombeo sea cero en todas las terminales, para hacer esto necesitamos que todos los cables sean equivalentes entre sí. La configuración necesaria para que esto suceda depende de los detalles de la red, que para el caso de grafeno debe tener simetría de rotación en $2\pi/3$ y simetría de inversión. La configuración más simple que cumple con estas simetrías análogas a las simetrías de la red subyacente es la configuración hexagonal.

En la Fig. 4.7 (a) vemos los resultados para la conductancia en la configuración hexagonal de scattering en detalle para el gap en el punto de Dirac y en el gap dinámico, midiendo la caída de potencial entre los terminales 1 y 6, que son los terminales entre los que pasa corriente. En el panel (b) podemos observar que la resistencia Hall R_{xy} (medida entre las terminales 2 y 4, cuando la corriente pasa entre las terminales 1 y 6) es no nula en los gaps de Floquet inducidos por la radiación. Vemos que su perfil es muy similar al de la Fig. 4.2 (b), en los que la conductancia está fuertemente modulada, llegando incluso a anularse dentro del gap dinámico a energías menores a $\hbar\Omega/2$, donde la proyección de pseudoespín es

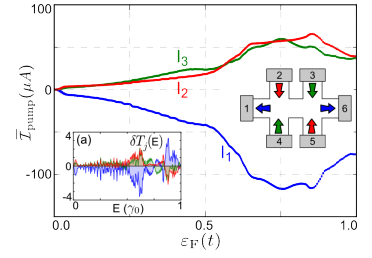
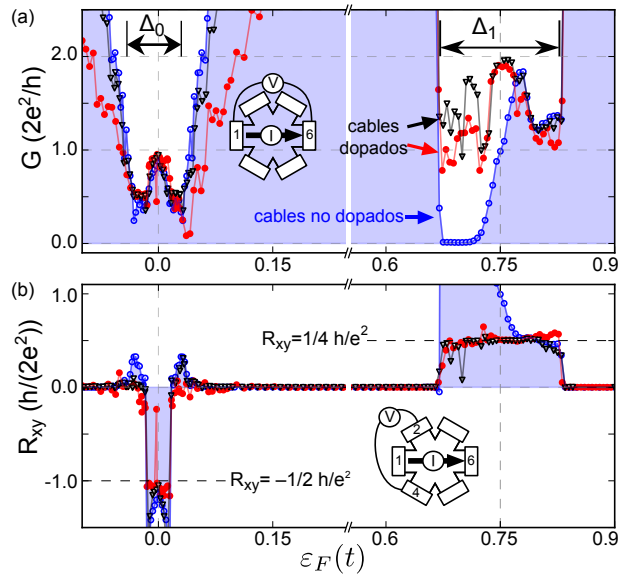


Fig. 4.6: Corrientes de bombeo en un esquema multiterminal con forma de «H». La asimetría entre los cables hace que los coeficientes de transmisión $\delta\mathcal{T}_j(\varepsilon)$ sean distintos de cero (ver recuadro). La muestra irradiada (con los parámetros de la Fig. 4.7) es un rectángulo de ancho $W = 99a$ y largo $L = 512a$ conectada longitudinalmente a cables de grafeno zigzag del mismo ancho (1 y 6) y transversalmente con cables de bordes armchair (1 a 5). [80].

antiparalela a la de los modos propagantes en los cables, mientras que es paralela para energías mayores a $\hbar\Omega/2$. Los círculos vacíos azules con área sombreada por debajo corresponden a cables no dopados, mientras que los triángulos negros y círculos rojos corresponden a cables altamente dopados. Al dopar los cables, la energía de los modos entrantes respecto del punto de Dirac (de los cables) aumenta considerablemente, más allá de la singularidad de van Hove donde los modos del grafeno ya no son de tipo Dirac y el pseudospín no está fijado por la dirección de propagación o del vector de onda k . Esto evita los efectos de mismatch (explicados en la Sección 4.1.1) entre los cables y la muestra irradiada.

Cuando los cables están dopados la resistencia Hall (Fig. 4.7) (b) muestra *plateaus* de cuantización aproximados a valores de $R_{xy} = -1 \frac{h}{2e^2}$ para el gap en $\varepsilon = 0$, mientras que para el gap en $\varepsilon = \hbar\Omega/2$ la resistencia Hall esté cuantizada en $R_{xy} = 1/2 \frac{h}{2e^2}$.

Fig. 4.7: Configuración hexagonal de grafeno irradiado con luz circularmente polarizada de frecuencia $\hbar\Omega = 1,5t$ e intensidad $z = 0,15$. En el panel (a) se muestra la conductancia cuando la corriente pasa por terminales opuestas, por ejemplo la 1 y 6 y la caída de potencial se mide entre las mismas. En el panel (b) vemos los resultados para la resistencia Hall medida entre las terminales 3 y 4, cuando la corriente pasa entre las terminales 1 y 6. Los resultados para los cables no dopados aparecen en círculos azules, para dopaje de tipo n en triángulos negros (energía de sitio corrida en $0,75t$) y círculos rojos (energía de sitio corrida en $1,25t$) [80].



A pesar de que las intensidad y frecuencias utilizadas hasta el momento son muy altas, reflejan las características principales de transporte de los aislantes topológicos de Floquet para un sistema de Dirac con dispersión lineal. Los resultados presentados hasta ahora son un compromiso entre frecuencia e intensidad lo más baja posible para obtener gaps y estados topológicos bien definidos, manteniendo la viabilidad de los cálculos numéricos y la validez del modelo. Simular un sistema multiterminal de baja frecuencia e intensidad (parámetros más realistas) con cables lo suficientemente anchos para que los estados topológicos se desarrollen requiere un muy alto costo computacional. Para mostrar la estabilidad de los plateaus Hall, podemos comparar la resistencia R_{xy} dentro del gap del punto de Dirac entre distintas intensidades de láser. En la Fig. 4.8 vemos la resistencia no local para un láser de intensidades $z = 0,15$ (triángulos oscuros) y $z = 0,25$ (línea con cuadrados y área sombreada). La intensidad más alta genera un rango más ancho donde R_{xy} es no nula, que se acerca aun más al valor de cuantización $R_{xy} = -1 \frac{h}{2e^2}$.

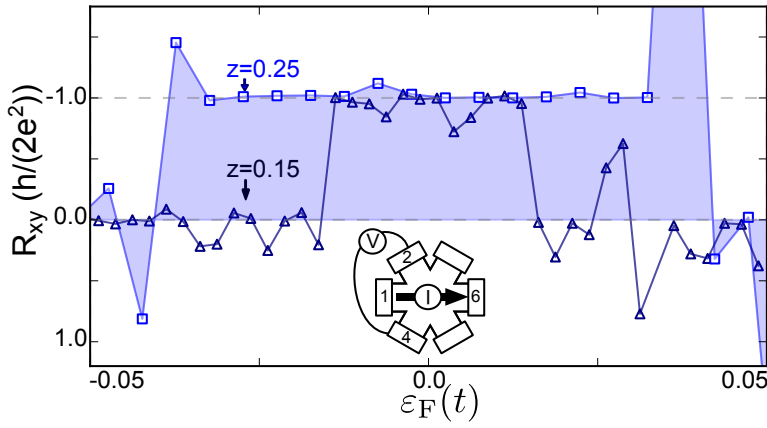


Fig. 4.8: Resistencia Hall (medida como se muestra en el recuadro) cerca del punto de Dirac para la configuración hexagonal de grafeno irradiado con $\hbar\Omega = 1,5t$ con cables zigzag de ancho $W = 99a$ dopados tipo n (energías de sitios desplazadas en $1,5t$). Los triángulos son los resultados para un láser de intensidad $z = 0,15$, mientras que los cuadrados para $z = 0,25$. *Figura adaptada de [80].*

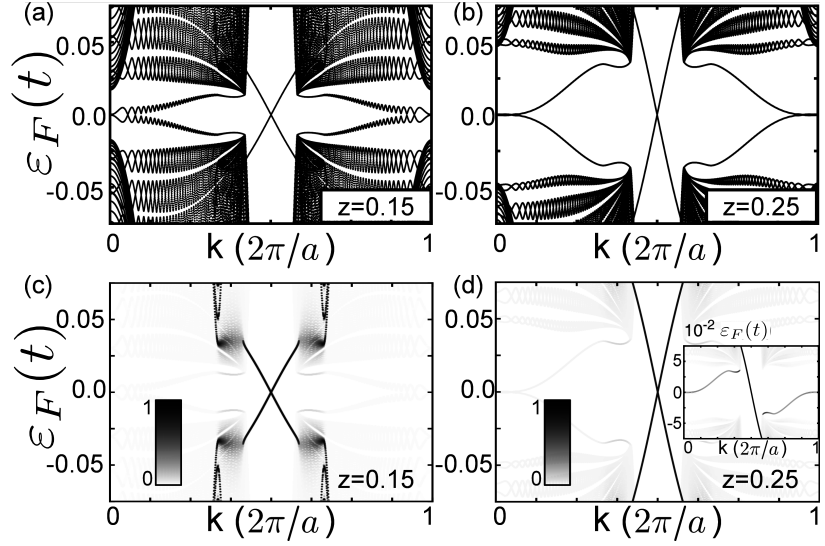
4.2.1. Relación entre los plateaus de conductancia Hall y el número de canales efectivos

En los aislantes topológicos de Floquet el número de winding es el invariante topológico que relaciona las propiedades del bulk con el número de estados de borde del sistema. A diferencia de los aislantes topológicos estáticos, el número de estados de borde no está directamente relacionado con la cuantización de los plateaus de conductancia Hall.

Por ejemplo, la resistencia Hall del grafeno irradiado con luz circularmente polarizada de frecuencia $\hbar\Omega = 1,5t$ e intensidad $z = 0,15$ o $z = 0,25$ es de $R_{xy} \approx -1G_0$. Esta conductancia está dada por un solo estado de borde de quiralidad negativa. Sin embargo, podemos observar en la Fig 4.9 (a) y (b) que existe más de un modo propagante en el gap en $\epsilon \approx 0$ para ambas intensidades. En ambos casos existe un par de estados de borde que cruza $\epsilon = 0$ cuando $k = \pi/a$ y otro par de estados en $k = 0, 2\pi/a$. En los paneles (c) y (d), vemos la misma relación de dispersión de los paneles superiores, pero proyectada sobre la réplica $n = 0$. En escala de color se muestra la contribución de los estados al promedio temporal de la densidad de estados de blanco ($w^0 = 0$) a negro ($w^0 = 1$). Mientras que los estados en $k = \pi/a$ tienen peso ≈ 1 sobre la réplica $n = 0$, los estados en $k = 0, 2\pi/a$ tienen peso ≈ 0 . Estos estados permanecen ocultos a este cálculo de transporte, ya que no tienen peso sobre la réplica $n = 0$, los modos propagantes de los cables no pueden acoplarse a ellos. Más aun, podemos verificar que los estados topológicos cerca de $k = 2\pi/a$ tienen quiralidad positiva, opuesta a los estados en $k = \pi/a$, como puede observarse en el recuadro de la Fig 4.9 (d), donde vemos la dispersión proyectada sobre la réplica $n = 0$ y pesada solo en una mitad de la cinta, para resaltar la quiralidad de los estados topológicos.

Aunque los estados lejos de $k_x = \pi/a$ no contribuyan a la conductancia Hall, sí podemos ver (Fig. 4.9 (a) y (c)) que el gap efectivo, donde la resistencia Hall es distinta de cero, se ve reducido por zonas donde las réplicas de orden superior se hibridizan con modos de la réplica $n = 0$, generando estados extendidos que no contribuyen a la conductancia no local. Este tipo de modificaciones en el ancho del

Fig. 4.9: Relación de dispersión efectiva para una cinta zigzag de ancho $W = 99a$, iluminada por un láser circularmente polarizado de frecuencia $\hbar\Omega = 1,5t$ e intensidades (a) $z = 0,15$ y (b) $z = 0,25$. En los paneles (c) y (d) se muestran los mismos resultados pero destacando (en escala de color) el peso de los estados sobre la réplica $n = 0$, en blanco $w^0 = 0$ y en negro $w^0 = 1$. El pequeño recuadro en (d) muestra la densidad local de estados sobre una mitad de la cinta para resaltar la distinta quiralidad de los estados cerca de $\varepsilon = 0$: el estado que pasa por $k = \pi/a$ tiene quiralidad opuesta al estado en $k = 2\pi/a$. [80].



gap no se observan en el gap dinámico a $\varepsilon \approx \hbar\Omega/2$, ya que este gap es de primer orden en la intensidad z y es más robusto frente a efectos de orden superior.

Esto muestra que para una configuración de scattering, donde los cables no irradiados poseen ocupaciones bien definidas, la conductancia Hall de los aislantes topológicos de Floquet quiebra la correspondencia entre el número de estados quirales y el valor de cuantización de la conductancia Hall. En cambio, la conductancia de los aislantes topológicos de Floquet alcanza plateaus en el número de canales activos, una vez que se ajustan los empalmes entre los modos del sistema y los cables.

El número de Chern puede no ser suficiente para caracterizar la topología de los sistemas forzados periódicamente. En el esquema de scattering con cables no irradiados debemos considerar el número de estados que contribuyen al promedio temporal de la densidad de estados, para dar cuenta correctamente de la cuantización de la conductancia Hall. Algunos estados topológicos de Floquet permanecen ocultos a esta configuración de transporte, aunque podrían manifestarse a intensidades grandes o en otro tipo de medición, como por ejemplo correlaciones de ruido o en mediciones que utilicen corrientes dependientes del tiempo.

4.3. Contribuciones originales

- Desarrollo de códigos propios para obtener resultados preliminares de las relaciones de dispersión y conductancia a dos terminales.
- Explicación de la modulación en la conductancia dos terminales con cables no dopados, donde existe un desacople entre los modos normales soportados por el cable no irradiado y la muestra irradiada, este desacople proviene principalmente del hecho de que el estado topológico tiene una textura de pseudospín distinta a la de los modos propagantes de los cables.

- Se aborda la respuesta no local de un aislante topológico de Floquet con cálculos de scattering multiterminal, presentado los primeros resultados tanto para el gap en el punto de Dirac, como el gap dinámico. Se muestra que la cuantización de la conductancia depende del número de canales topológicos activos, una vez que se reduce el despalme entre los modos electrónicos de los cables y la región de scattering.

CAPÍTULO 5

JERARQUÍA DE LOS GAPS Y DE LOS ESTADOS TOPOLÓGICOS ASOCIADOS

Contenidos

5.1. Gaps del orden del número de procesos fotónicos	63
5.1.1. Invariantes topológicos de las bandas de Floquet	63
5.1.2. Múltiples procesos fotónicos en bajas frecuencias	67
5.2. Mapa de transiciones de fases topológicas	73
5.2.1. Frecuencias intermedias e intensidades altas	73
5.2.2. Transiciones al variar frecuencia e intensidad	73
5.3. Contribuciones originales	75

Abstract

El potencial electromagnético de un láser induce gaps y estados de borde en grafeno. A medida que baja la frecuencia de la radiación el espectro de Floquet tiene una estructura cada vez más compleja. Mientras que el régimen de altas frecuencias es el más simple de analizar, en este Capítulo nos enfocamos en los múltiples procesos de emisión y absorción fotónica que se habilitan a bajas frecuencias. Para describir estos procesos utilizamos Hamiltonianos efectivos que dan cuenta de las propiedades topológicas de cada gap y de los estados topológicos asociados y revelan la jerarquía anidada que clasifica a los gaps según el orden del proceso fotónico asociado. Cuando las frecuencias son intermedias, recurrimos al cálculo explícito del invariante topológico, que nos permite alcanzar distintas fases topológicas al variar la intensidad. Este método junto al mapa de transiciones de fase topológica da cuenta de la compleja estructura de bandas del Hamiltoniano de Floquet para un amplio rango de frecuencias.

Los aislantes topológicos de Floquet son propuestos como la realización dinámica de los aislantes topológicos donde las propiedades topológicas son inducidas por un potencial periódico en el tiempo. La descripción topológica de estos sistemas sigue siendo tema de intensa investigación [84, 67, 68, 70, 85], tanto al respecto del llenado de las bandas de Floquet, como de los mecanismos de disipación que estabilizan el sistema [69, 71, 72] (ver discusión en el Capítulo 4). Por otro lado, también se busca un marco teórico para caracterizar la topología del espectro del

Hamiltoniano de Floquet. La principal diferencia con respecto a los materiales en equilibrio es que el espectro de Floquet es no acotado y periódico en $\hbar\Omega$. Este espectro también puede obtenerse de los autovalores del operador evolución temporal [36, 86, 62, 63]. Si observamos la evolución a tiempos discretos nT , con T el periodo del potencial [61], el operador evolución es equivalente al de un sistema estático gobernado por un Hamiltoniano efectivo \mathcal{H}_{eff} . Entonces, analizando la topología de H_{eff} , podemos obtener las propiedades topológicas del sistema de Floquet. Esta aproximación es válida siempre que no existan singularidades en el espectro instantáneo a tiempos menores que T [62]. Además, cuando exigimos la conservación de alguna simetría extra, puede que necesitemos de un nuevo invariante topológico (relacionado con el número de winding) para describir la topología del sistema. Por ejemplo si tanto el sistema como el potencial periódico conservan la simetría de reversión temporal (TRS), el invariante propuesto en [63] es un invariante \mathcal{Z}_2 para describir la topología de estos sistemas y recientemente también se ha propuesto un invariante para sistemas de Floquet con simetría quiral [87]

Cuando la frecuencia es mucho más grande que el ancho de banda del sistema, el Hamiltoniano efectivo que describe la evolución estroboscópica del sistema puede ser aproximado por una renormalización de la réplica $n = 0$, que a primer orden sólo depende de las réplicas $n = \pm 1$ [30],

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \mathcal{H}^0 + \mathcal{H}^1 \mathcal{G}^1(0) \mathcal{H}^{-1} + \mathcal{H}^{-1} \mathcal{G}^1(0) \mathcal{H}^1. \quad (5.1)$$

Esta aproximación deja de ser válida cuando la frecuencia baja y el número de procesos fotónicos de absorción/emisión permitidos aumenta considerablemente; o bien cuando la intensidad del potencial periódico aumenta. En este caso podemos recurrir al método de la zona de Floquet extendida presentado en [36], que se basa en considerar un número *suficiente* de réplicas de Floquet y calcular los números de Chern de cada banda de Floquet, para obtener el número de winding.

En este Capítulo nos basamos en el número de winding para describir la topología de los gaps y estados topológicos de Floquet asociados. El número de winding $W(\varepsilon)$ es el invariante topológico que describe correctamente el número de estados topológicos en cada gap en el espectro de Floquet y podemos utilizarlo para frecuencias intermedias y altas. Sin embargo cuando la frecuencia es muy baja, el cálculo exacto de los números de Chern se vuelve computacionalmente muy costoso, lo que imposibilita obtener los números de winding directamente. En la Sección 5.1 derivamos un algoritmo alternativo, a partir del cálculo del número de winding, que es válido cuando la frecuencia fotónica es mucho más baja que el ancho de banda del sistema $\hbar\Omega \ll \Delta$ y nos permite obtener de manera constructiva las contribuciones al número de winding, a medida que incluimos un mayor número de réplicas de Floquet. En la Sección 5.2 presentamos el cálculo completo del número de winding, analizando las transiciones de fases topológicas que se producen al variar la frecuencia e intensidad de la radiación.

5.1. Gaps del orden del número de procesos fotónicos

En esta sección trataremos el caso de bajas frecuencias y bajas intensidades, en donde la aproximación $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ es válida –como veremos luego esta validez se extiende hasta energías cercanas a la singularidad de van Hove para grafeno ya que sólo necesitamos que el modelo describa bien la topología y textura de pseudoespín del sistema.

Primero analizamos la topología del grafeno irradiado, calculando el número de Chern de cada banda de Floquet como la integral de la curvatura de Berry. La radiación abre gaps en los cruces (evitados) entre las distintas réplicas de Floquet. Las zonas en el espacio \mathbf{k} donde ocurren los cruces representan las zonas de principal contribución al número de Chern (mayor curvatura de Berry). Luego, veremos cómo podemos describir los cruces de las distintas réplicas a través de Hamiltonianos efectivos. Utilizando estos Hamiltonianos podemos probar que el orden del gap está dado por el número de réplicas involucradas, lo que genera una estructura anidada de gaps y estados topológicos de Floquet.

En el caso de grafeno, donde la relación de dispersión a bajas energías toma la forma de dos conos enfrentados, los cruces entre distintas réplicas se producen en anillos centrado en $\mathbf{k} = 0$, cuyo radio está determinado las réplicas involucradas (ver Fig. 5.1), de forma similar a la estructura anidada de una muñeca rusa.

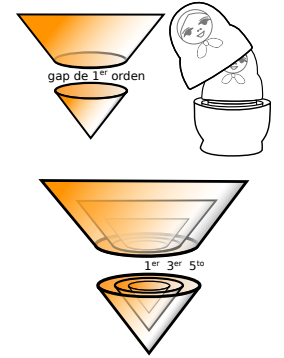


Fig. 5.1: Esquema de las réplicas de Floquet (sólo de las ramas positivas), donde los cruces en el gap dinámico se muestran como cortes en la relación de dispersión. Los cruces de orden superior envuelven a los de orden inferior de manera anidada lo que recuerda a las mamushkas.

5.1.1. Invariantes topológicos de las bandas de Floquet

Como vimos en la Sección 3.3, el número de winding es la suma de los números de Chern de las bandas inferiores y describe correctamente el número de estados y quiralidad que se encuentran en un gap en el espectro de Floquet.

Podemos simplificar aún más este cálculo si tenemos en cuenta que el grafeno en ausencia de radiación es un semiconductor de gap cero, cuyas bandas son triviales (número de Chern nulo). Recordemos que el número de Chern de la banda α es

$$\begin{aligned}
 C_\alpha &= \frac{i}{2\pi} \oint_{\mathcal{C}} \langle u_{\alpha\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} | u_{\alpha\mathbf{k}} \rangle \cdot d\mathbf{k} \\
 &= \frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{\text{BZ}} \langle \partial_{k_y} u_{\alpha\mathbf{k}} | \partial_{k_x} u_{\alpha\mathbf{k}} \rangle d^2k,
 \end{aligned} \tag{5.2}$$

donde $|u_{\alpha\mathbf{k}}\rangle$ es la autofunción de Bloch y \mathcal{C} el contorno de la zona de Brillouin [21]. El número de Chern también puede escribirse como la integral de la curvatura de Berry en la primera zona de Brillouin

$$C_\alpha = \frac{1}{2\pi} \int_{\text{BZ}} \mathbf{\Gamma}_{\alpha\mathbf{k}} \cdot d\mathbf{S}_{\mathbf{k}}, \tag{5.3}$$

con

$$\Gamma_{\alpha k} = \text{Im} \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{\langle u_{\alpha k} | \nabla_{\mathbf{k}} H_{\mathbf{k}} | u_{\beta k} \rangle \times \langle u_{\beta k} | \nabla_{\mathbf{k}} H_{\mathbf{k}} | u_{\alpha k} \rangle}{(\varepsilon_{\alpha k} - \varepsilon_{\beta k})^2}, \quad (5.4)$$

donde $\Gamma_{\alpha k}$ es explícitamente la curvatura de Berry.

Como vemos en la Ec. (5.4), los picos en la curvatura de Berry provienen de las zonas donde las energías están cuasi-degeneradas. Cuando sometemos al sistema a un potencial electromagnético periódico en el tiempo, obtenemos un espectro de Floquet cuyas réplicas se solapan unas con otras. Estos solapamientos son levantados (se remueven las degeneraciones) cuando la intensidad de la radiación es mayor que cero. Por lo tanto a intensidades muy bajas la principal contribución a la curvatura de Berry proviene de las zonas en el espacio \mathbf{k} donde las energías están cuasi- degeneradas.

El cálculo del número de winding involucra un espectro de Floquet truncado hasta un cierto número de réplicas, donde tenemos un número finito de bandas de Floquet. Si truncamos el espectro de Floquet entre las réplicas $-M$ y M (con un total de $2M + 1$ réplicas), obtenemos dos de bandas de Floquet por cada réplica considerada. Llamemos C_{α} al número de Chern de la banda α de Floquet, donde α está definido entre $-(2M + 1)$ y $(2M + 1)$. El esquema de zonas repetidas [36] nos dice que el número de winding W_{α} del gap por encima de la banda α está dado por la suma de los números de Chern de las bandas inferiores

$$W(\varepsilon_{\alpha}) = \sum_{\beta=-(2M+1)}^{\alpha} C_{\beta}, \quad (5.5)$$

siempre que el número de réplicas incluidos en el cálculo sea suficientemente grande para que el cálculo converja.

En la Fig. 5.2 vemos la densidad de estados que se calculada cerca del borde de un plano semi-infinito de grafeno irradiado, donde, por ejemplo para $M = 2$, los números de Chern de las bandas de Floquet C_{α} varían hasta que $C_{\alpha} = \pm 4$ para las bandas centrales. Como resultado, el número de winding $W_0 = 0$ para el gap en $\varepsilon_0 = 0$ y $W_{1/2} = -4$ para el gap en $\varepsilon_{1/2} = \hbar\Omega/2$ reflejan el número de estados de cada gap. En el primer caso $W_0 = 0$ nos dice que el número total de estados es cero, aunque el gap está cruzado por dos estados de quiralidades opuestas, en cambio $W_{1/2} = -4$ nos dice que dentro del gap hay 4 estados con la misma quiralidad.

A pesar de utilizar el formalismo de las zonas repetidas de Floquet y el Hamiltoniano truncado con un número finito de bandas, debemos recordar que nuestro objetivo es dar cuenta de la topología del espectro de Floquet completo (periódico y no acotado). La mejor aproximación al espectro de Floquet completo, son las bandas centrales del Hamiltoniano de Floquet truncado (bandas $\alpha = 0$ y $\alpha = 1$ en la Fig. 5.2).

A medida que la frecuencia se hace más baja, el cálculo explícito resulta numéricamente muy costoso *. En esta sección haremos uso de otra aproximación que

*La densidad de puntos en el espacio \mathbf{k} que debemos considerar crece notoriamente porque los gaps de orden superior (cuyo origen es el cruce de réplicas de orden superior) son cada vez más pequeños y su curvatura de Berry muy pronunciada, además de que múltiples réplicas deben ser incluidas en el cálculo numérico y crece la matriz del Hamiltoniano de Floquet.

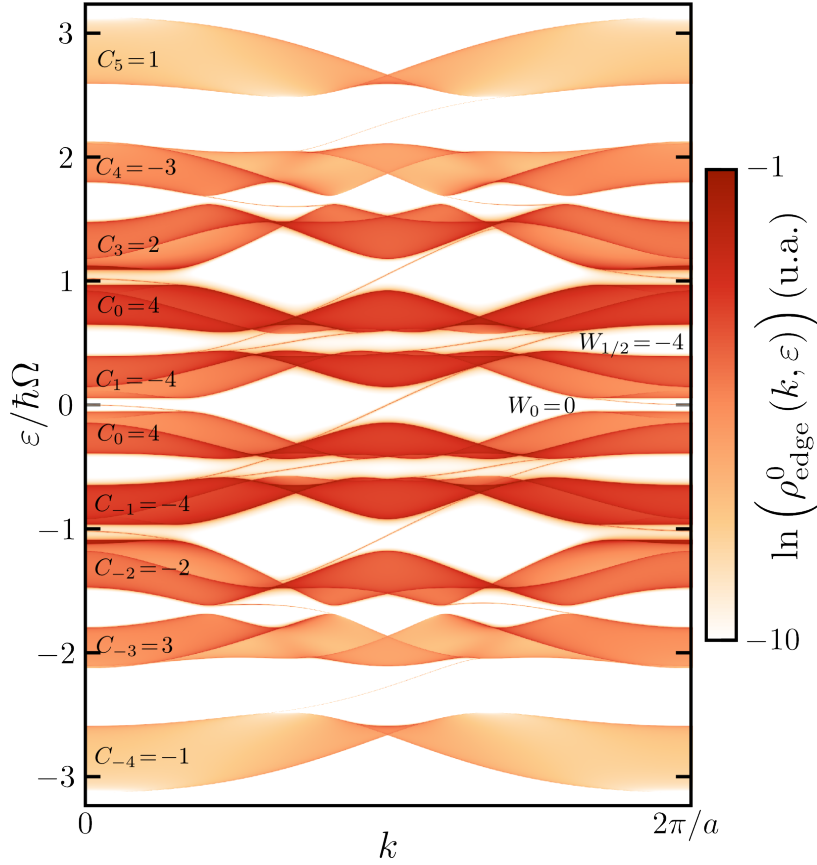


Fig. 5.2: Esquema de zonas repetidas de Floquet. Las bandas de Floquet se muestran para un plano semi-infinito de una red hexagonal irradiada, truncado entre $(-M, M)$ réplicas con $M = 2$. Los números de Chern C_j de cada banda se muestran dentro de las 10 bandas de Floquet, mientras que los números de winding $W(\varepsilon_0)$ y $W(\varepsilon_{1/2})$ aparecen dentro de los gaps alrededor de ε_0 y $\varepsilon_{1/2}$, respectivamente. Los números de winding caracterizan el total de estados quirales dentro del gap, siendo $W(\varepsilon_0) = 0$, por lo que en ε_0 hay dos estados de quiralidades opuestas y $W(\varepsilon_{1/2}) = -4$ por lo que en $\varepsilon_{1/2}$ hay cuatro estados con la misma quiralidad. *Figura adaptada de [88].*

sirve para calcular de manera constructiva las contribuciones al número de winding en el régimen de bajas frecuencias.

Para calcular las contribuciones al número de winding recordemos que este invariante topológico es la suma de los números de Chern cuando calculamos el espectro del Hamiltoniano de Floquet truncado a un número suficiente de réplicas [36]. El número de Chern de la banda α de Floquet, en el límite de intensidades bajas, es la suma de las contribuciones del espacio k donde el espectro se encuentra cuasi-degenerado debido a los cruces con otras réplicas de Floquet. Los cruces de la banda α pueden ser tanto por encima, con la banda $(\alpha + 1)$ cuyas contribuciones $c_{p,\alpha}^{\text{up}}$ provienen de los puntos $k_{p,\alpha}$; como por debajo, con la banda $\alpha - 1$, dando contribuciones $c_{p',\alpha}^{\text{low}}$ que provienen de los puntos posiblemente distintos $k_{p',\alpha}$. Luego obtenemos

$$C_\alpha = \sum_p c_{p,\alpha}^{\text{up}} + \sum_{p'} c_{p',\alpha}^{\text{low}}, \quad (5.6)$$

siempre que no sea la primera o la última banda, es decir $\alpha \neq -(2M + 1)$ o $\alpha \neq (2M + 1)$, en cuyo caso no debemos incluir en la suma de $c_{p',\alpha}^{\text{low}}$ o $c_{p,\alpha}^{\text{up}}$.

Debido a que las contribuciones dentro de un cruce evitado tienen distintos signos entre la banda de arriba y la de abajo

$$c_{p,\alpha}^{\text{up}} = -c_{p,(\alpha+1)}^{\text{low}}, \quad (5.7)$$

podemos deducir que el número de winding, al ser la suma parcial de los números de Chern, tendrá ambas contribuciones de manera que se cancelen entre ellas, excepto por las últimas contribuciones

$$\begin{aligned}
W_\alpha &= \sum_\beta^\alpha C_\beta \\
&= \sum_\beta^\alpha \left(\sum_p C_{p,\beta}^{\text{up}} + \sum_{p'} C_{p',\beta}^{\text{low}} \right) \\
&= \sum_p C_{p,\alpha}^{\text{up}}.
\end{aligned} \tag{5.8}$$

Vemos que el número de winding queda definido solamente por las contribuciones superiores ($C_{p,\alpha}^{\text{up}}$) al número de Chern de la banda inferior, y podemos descartar el superíndice.

El espectro de Floquet completo (Hamiltoniano de Floquet no truncado) está dividido en dos bandas que se repiten a intervalos de $\hbar\Omega$. Estas bandas tienen gaps en ε_0 y $\varepsilon_{1/2}$. Caracterizamos los números de winding con W_0 y $W_{1/2}$ respectivamente. Para obtenerlos debemos sumar las contribuciones que llamaremos $c_{p,\beta}$, con $\beta = 0$ y $\beta = 1/2$.

El siguiente paso es encontrar los puntos $k_{p,\beta}$, las contribuciones están bien separadas en el espacio \mathbf{k} y podemos indexarlas distinguiendo las contribuciones dentro del gap en $\varepsilon_0 = 0$ y en $\varepsilon_{1/2} = \hbar\Omega/2$. Por la simetría electrón-hueco y la relación de dispersión cónica del grafeno podemos intuir que las zonas de cuasi-degeneración serán los anillos de radio $k_{p,\beta}$ centrados en $\mathbf{k} = 0$ para cada valle K_+ y K_- . Para ver esto más claramente, escribimos el Hamiltoniano de Floquet en la base $\{1/\sqrt{2}, \pm \exp(i\theta_{\mathbf{k}})/\sqrt{2}\}^T$ que diagonaliza los subespacios de cada réplica $\mathcal{H}_0 + n\hbar\Omega\mathcal{I}$ y obtenemos

$$\tilde{\mathcal{H}}_F^\infty(\mathbf{k}, \theta_{\mathbf{k}}) = \begin{pmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ \dots & \tilde{H}_0^{(1)}(\mathbf{k}) & \tilde{V}(\theta_{\mathbf{k}}) & 0 & \dots \\ \dots & \tilde{V}(\theta_{\mathbf{k}})^\dagger & \tilde{H}_0^{(0)}(\mathbf{k}) & \tilde{V}(\theta_{\mathbf{k}}) & \dots \\ \dots & 0 & \tilde{V}(\theta_{\mathbf{k}})^\dagger & \tilde{H}_0^{(-1)}(\mathbf{k}) & \dots \\ \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \tag{5.9}$$

donde

$$\tilde{H}_0^{(n)}(\mathbf{k}) = v_F \begin{pmatrix} k & 0 \\ 0 & -k \end{pmatrix} + nv_F 2k_0 I \tag{5.10}$$

$$\tilde{V}(\theta_{\mathbf{k}}) = \eta k_0 e^{-i\theta_{\mathbf{k}}} \begin{pmatrix} 1 & e^{i\lambda} \\ -e^{-i\lambda} & -1 \end{pmatrix}, \tag{5.11}$$

donde $e^{i\lambda}$ es una fase trivial entre los vectores de base, de ahora en más $\lambda = 0$, $\theta_{\mathbf{k}}$ es el ángulo entre \mathbf{k} y el eje x y $2v_F k_0$ reemplaza $\hbar\Omega$ para hacer evidentes los cruces en el espacio \mathbf{k} .

Los valores del módulo de k donde se cruzan las réplicas son $k_{p,\beta} = 2k_0(p + \beta)$, donde $\beta = 0$ o $1/2$, según estemos calculando las contribuciones al gap en ε_0 o $\varepsilon_{1/2}$. En la Fig. 5.3 vemos esquemáticamente los cruces entre las distintas réplicas que se producen en los puntos $k_{p,\beta}$. Además los cruces de orden más alto envuelven a los de orden inferior, lo que le da una jerarquía indexada por el orden de los procesos fotónicos que originan los gaps.

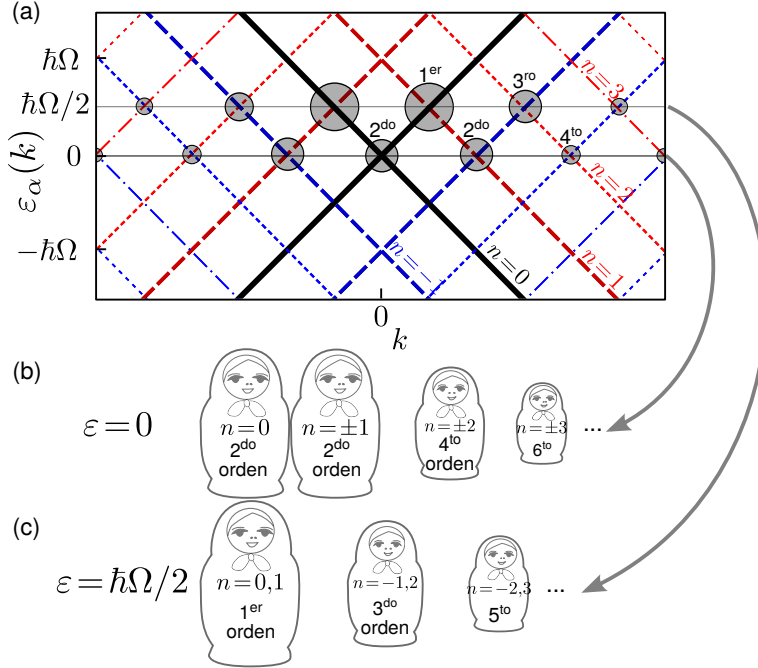


Fig. 5.3: (a) Réplicas de Floquet para un sistema tipo Dirac, en negro para la réplica $n = 0$ y en rojo (azul) para las réplicas con $n > 0$ ($n < 0$). Los cruces entre las distintas bandas n y m se producen a dos energías no equivalentes (módulo $\hbar\Omega$), $\varepsilon_0 = 0$ cuando $n + m = 0$ y $\varepsilon_{\pm 1/2} = \pm \hbar\Omega/2$ cuando $n + m = \pm 1$. Los distintos cruces originan gaps de distintos órdenes según las réplicas involucradas. (b) Los gaps en ε_0 son de orden par $n - m$ (excepto en el caso que $n = m = 0$ donde el gap proviene de la renormalización de las bandas). (c) Los gaps en $\varepsilon_{1/2}$ son de orden impar $n - m$. [88].

5.1.2. Múltiples procesos fotónicos en bajas frecuencias

Podemos deducir ahora, a partir de la Ec. 5.9 los Hamiltonianos efectivos que describen los cruces entre distintas réplicas. Teniendo en cuenta la analogía entre el teorema de Floquet y el teorema de Bloch, podemos definir una zona donde restringir la coordenada periódica. Para el Hamiltoniano de Bloch podemos restringir el cuasimomento k a la primera zona de Brillouin y para el Hamiltoniano de Floquet podemos definir la primera zona de Floquet (FZ) como la región entre $\pm \hbar\Omega/2$ de cuasi-energías. Debemos diferenciar los cruces entre réplicas que ocurren en el centro de la FZ ($\varepsilon_0 = 0$), de los que ocurren en el borde de la FZ ($\varepsilon_{1/2} = \hbar\Omega/2$).

Gaps en el borde de la zona de Floquet

El caso más simple es el que describe el gap dinámico a primer orden. Para describir este cruce sólo hace falta retener las réplicas $n = 0$ y $n = 1$

$$\tilde{\mathcal{H}}_F^{0,1}(\mathbf{k}) = v_F \begin{pmatrix} k + 2k_0 & 0 & \eta k_0 e^{-i\theta_{\mathbf{k}}} & \eta k_0 e^{-i\theta_{\mathbf{k}}} \\ 0 & -k + 2k_0 & -\eta k_0 e^{-i\theta_{\mathbf{k}}} & -\eta k_0 e^{-i\theta_{\mathbf{k}}} \\ \eta k_0 e^{i\theta_{\mathbf{k}}} & -\eta k_0 e^{i\theta_{\mathbf{k}}} & k & 0 \\ \eta k_0 e^{i\theta_{\mathbf{k}}} & -\eta k_0 e^{i\theta_{\mathbf{k}}} & 0 & -k \end{pmatrix}, \quad (5.12)$$

donde el recuadro central contiene los subespacios degenerados cuando $k = k_{0,1/2} = k_0$ y la tilde nos recuerda que está definido en la base rotada. El Hamiltoniano efectivo $\tilde{\mathcal{H}}_F^{\text{eff}}(\mathbf{k}, p, \beta)$ en este caso es

$$\tilde{\mathcal{H}}_F^{\text{eff}}(\mathbf{k}, 0, 1/2) = v_F \begin{pmatrix} -k + 2k_0 & -\eta k_0 e^{-i\theta_{\mathbf{k}}} \\ -\eta k_0 e^{i\theta_{\mathbf{k}}} & k \end{pmatrix}, \quad (5.13)$$

y en el caso general podemos escribirlo como $\tilde{\mathcal{H}}_F^{\text{eff}}(\mathbf{k}, p, \beta) = \tilde{\mathbf{h}}_{p,\beta}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} + \varepsilon_{\beta} \mathcal{I}$, donde la tilde indica la base rotada, $\boldsymbol{\sigma}$ es el vector de las matrices de Pauli y \mathcal{I} es la matriz 2×2 identidad.

Para calcular la contribución al número de Chern debemos volver a la base no rotada y reescribiendo la Ec. (5.3) obtenemos

$$c_{p,\beta} = \frac{1}{4\pi} \int \hat{\mathbf{h}}_{p,\beta} \cdot (\partial_{k_x} \hat{\mathbf{h}}_{p,\beta} \times \partial_{k_y} \hat{\mathbf{h}}_{p,\beta}) d^2 k. \quad (5.14)$$

donde $\hat{\mathbf{h}}_{p,\beta} = \mathbf{h}_{p,\beta} / |\mathbf{h}_{p,\beta}|$ está definido en la base no rotada. Esta expresión tiene que ser reformulada en la base rotada ya que los vectores base dependen de $\theta_{\mathbf{k}}$, lo que implica una rotación \dagger del vector efectivo $\tilde{\mathbf{h}}_{p,\beta} = \mathbf{R}(\theta_{\mathbf{k}}) \mathbf{h}_{p,\beta}$. Usando coordenadas polares obtenemos

$$\begin{aligned} c_{p,\beta} &= \frac{1}{4\pi} \int \mathbf{h}_{p,\beta} \cdot (\partial_{\theta} \mathbf{h}_{p,\beta} \times \partial_k \mathbf{h}_{p,\beta}) \frac{1}{|\mathbf{h}_{p,\beta}|^3} dk d\theta \\ &= \frac{1}{4\pi} \int \tilde{\mathbf{h}}_{p,\beta} \cdot (\partial_{\theta} \tilde{\mathbf{h}}_{p,\beta} \times \partial_k \tilde{\mathbf{h}}_{p,\beta}) \frac{1}{|\tilde{\mathbf{h}}_{p,\beta}|^3} dk d\theta \\ &\quad + \frac{1}{4\pi} \int \tilde{\mathbf{h}}_{p,\beta} \cdot (\mathbf{R}^{-1} \partial_{\theta} \mathbf{R} \tilde{\mathbf{h}}_{p,\beta} \times \partial_k \tilde{\mathbf{h}}_{p,\beta}) \frac{1}{|\tilde{\mathbf{h}}_{p,\beta}|^3} dk d\theta. \end{aligned} \quad (5.15)$$

En la Ec. (5.15) hacemos uso de la rápida convergencia del integrando para extender la integral a todo el espacio \mathbf{k} .

A la misma energía $\varepsilon_{1/2}$ el próximo cruce entre las réplicas $n = -1$ y $n = 2$ será en $k_{1,1/2} = 3k_0$. En este caso debemos decimar \ddagger las réplicas $n = 0$ y $n = 1$, de manera que se renormalizan los acoples entre las distintas réplicas, generando un gap de tercer orden ($\mathcal{O}(\eta^3)$) en el parámetro de acople electrón-fotón. Si definimos en función de la Ec. (5.10) la función de Green

$$\tilde{G}^n(\varepsilon, k_{p,\beta}) = \frac{1}{\varepsilon \mathcal{I} - \tilde{H}^n(k_{p,\beta})}, \quad (5.16)$$

entonces los acoples entre la réplica $m = -1$ y $n = 2$ renormalizados serán

$$\tilde{V}_{2,-1}(\theta_{\mathbf{k}}) = \tilde{V}(\theta_{\mathbf{k}}) \tilde{G}^1(\varepsilon_{1/2}, k_{1,1/2}) \tilde{V}(\theta_{\mathbf{k}}) \tilde{G}^0(\varepsilon_{1/2}, k_{1,1/2}) \tilde{V}(\theta_{\mathbf{k}}), \quad (5.17)$$

donde el subíndice $(2, -1)$ indica el orden de las réplicas que se acoplan. Además, las funciones de Green deben ser evaluadas a la energía $\varepsilon_{1/2}$ y en el radio del vector de onda $k_{1,1/2}$.

\dagger La rotación está hecha con la matriz

$$\mathbf{R}(\theta) = \begin{pmatrix} 0 & \sin \theta & \cos \theta \\ 0 & -\cos \theta & \sin \theta \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

que satisface la identidad

$$\mathbf{R}^{-1} \partial_{\theta} \mathbf{R} \hat{\mathbf{h}}_{p,\beta} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{h}}_{p,\beta}.$$

\ddagger El proceso de decimación consiste en reducir un problema de autovalores $\mathbf{H}\mathbf{u} = \varepsilon\mathbf{u}$ reduciendo la matriz con el siguiente algoritmo [42]

$$\begin{pmatrix} H^1 & V & 0 \\ V^{\dagger} & H^0 & V \\ 0 & V^{\dagger} & H^{-1} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \tilde{H}^1 & \tilde{V} \\ \tilde{V}^{\dagger} & \tilde{H}^{-1} \end{pmatrix},$$

donde

$$\tilde{V} = V \frac{1}{\varepsilon - H^0} V$$

$$\tilde{H}^1 = H^1 + V \frac{1}{\varepsilon - H^0} V^{\dagger}$$

$$\tilde{H}^{-1} = H^{-1} + V^{\dagger} \frac{1}{\varepsilon - H^0} V.$$

Es fácil ver que en la base en que \tilde{H}^0 es diagonal, (Ec. (5.16)), dado que las funciones de Green están definidas como las inversas de matrices diagonales, entonces también $\tilde{G}^m(\varepsilon)$ será diagonal. Esto junto al prefactor de $\tilde{V}(\theta_{\mathbf{k}})$ de la Ec. (5.10), hace que los acoples $\tilde{V}_{n,m}(\theta_{\mathbf{k}})$ sean proporcionales a $\eta^{|n-m|}$. Por lo tanto, el siguiente cruce en el espacio \mathbf{k} será en $k_{2,1/2} = 5k_0$ entre las réplicas $m = -2$ y $n = 3$ y abrirá un gap de orden η^5 ya que debemos decimar las réplicas $n = -1, 0, 1, 2$. Siguiendo este análisis, cada vez que observamos un nuevo cruce, el orden del gap aumenta en η^2 .

Ahora podemos calcular explícitamente los vectores $\mathbf{h}_{p,1/2}$ que describen los cruces a energías $\varepsilon_{1/2}$ serán

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{h}}_{0,1/2}(\mathbf{k}) &= -\eta \hat{\xi}_1 k_{0,1/2} + (-k + k_{0,1/2}) \hat{\mathbf{z}} \\ \tilde{\mathbf{h}}_{1,1/2}(\mathbf{k}) &= -\eta^3 \hat{\xi}_3 k_{1,1/2} \frac{3}{16} + (-k + k_{1,1/2}) \hat{\mathbf{z}} \\ \tilde{\mathbf{h}}_{2,1/2}(\mathbf{k}) &= -\eta^5 \hat{\xi}_5 k_{2,1/2} \frac{80}{3969} + (-k + k_{2,1/2}) \hat{\mathbf{z}} \\ &\dots,\end{aligned}\tag{5.18}$$

donde, $\hat{\xi}_n = \cos(n\theta_{\mathbf{k}})\hat{\mathbf{x}} + \sin(n\theta_{\mathbf{k}})\hat{\mathbf{y}}$ gira n veces en el plano (x, y) al rededor del eje z mientras \mathbf{k} recorre la zona de Brillouin.

Utilizando los vectores de la Ec. (5.18) podemos calcular las contribuciones respectivas al número de winding según la Ec. (5.15) y vemos que

$$\begin{aligned}c_{0,1/2} &= 1 \\ c_{1,1/2} &= 3 \\ c_{2,1/2} &= 5 \\ &\dots,\end{aligned}\tag{5.19}$$

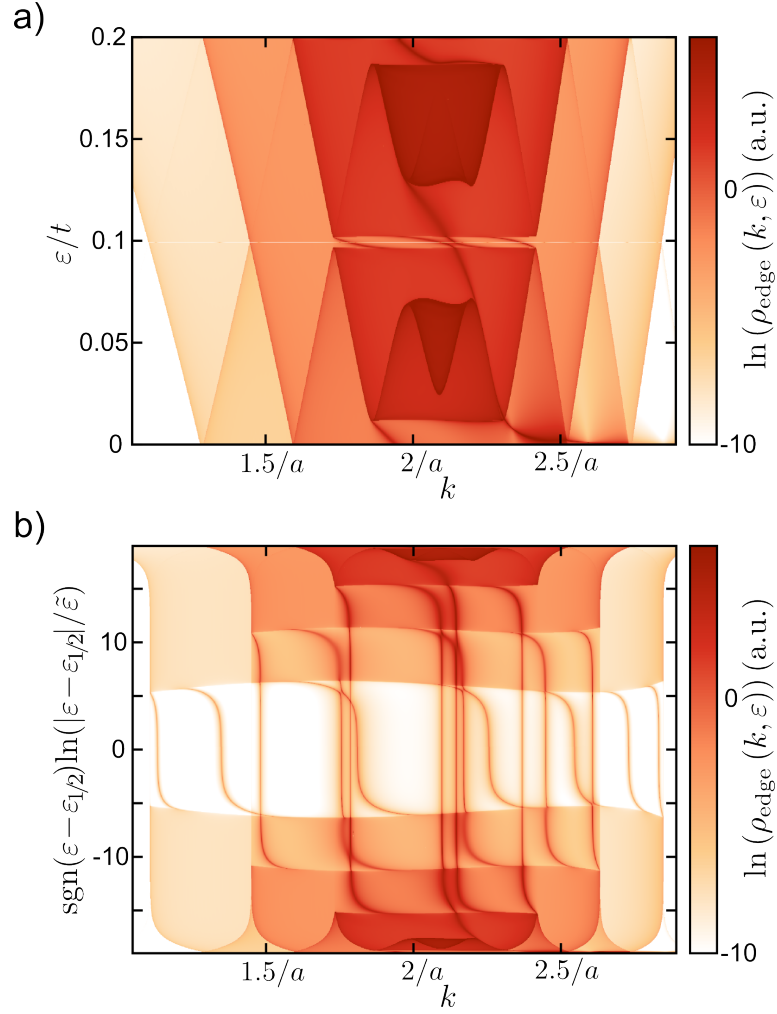
para cada valle K_+ y K_- . Los resultados numéricos del modelo tight-binding de una muestra semi-infinita de grafeno irradiado de la Fig. 5.4 están en perfecto acuerdo con los resultados analíticos. En el panel (a) vemos las réplicas diferenciadas por su color, que indica el peso en escala logarítmica sobre la réplica $n = 0$. Los cruces entre las réplicas generan los gaps de orden cada vez mayor (y ancho cada vez menor), de los que en (a) sólo se distinguen los primeros 2 gaps. En el panel (b) expandimos la escala de energías al rededor de $\varepsilon_{1/2}$ para tener poder aumentar la resolución cerca del gap, hasta una energía de corte $\tilde{\varepsilon}$ §.

§ Esta energía de corte $\tilde{\varepsilon}$ está limitada por la estabilidad numérica y la precisión utilizada en los cálculos.

Gaps en el centro de la zona de Floquet

Podemos aplicar el método anterior para encontrar los Hamiltonianos efectivos que describen los cruces a energía ε_0 , con la única excepción del cruce en $k_{0,0} = 0$ ya que en este caso, la rotación de la base no está bien definida (el ángulo $\theta_{\mathbf{k}}$ no está bien definido en $\mathbf{k} = 0$).

Fig. 5.4: (a) Densidad local de estados cerca del borde de un plano semi-infinito de una red hexagonal irradiada con $\hbar\Omega = 0,2t$ y $z = 0,05$ En escala logarítmica de color el peso sobre la LDOS promedio $\rho_{\text{edge}}(k, \varepsilon)$, resuelta en energía ε y en el momento cristalino k paralelo al borde. (b) La escala de energía está expandida logarítmicamente respecto del centro del gap en $\varepsilon_{1/2}$, hasta una energía mínima de corte $\tilde{\varepsilon} \approx 6t10^{-10}$. En (a) y (b) observamos que las réplicas de Floquet de orden alto se corresponden con un peso sobre la LDOS media de orden más alto, mientras que los gaps de orden superior se distinguen en el panel (b) junto con los estados de borde asociados. *Figura adaptada de [88].*



Para el cruce en $k = 0$ podemos renormalizar la réplica central $n = 0$ del Hamiltoniano de Floquet

$$\mathcal{H}_F(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} H^1(\mathbf{k}) & V(\theta_{\mathbf{k}}) & 0 \\ V(\theta_{\mathbf{k}})^\dagger & H^0(\mathbf{k}) & V(\theta_{\mathbf{k}}) \\ 0 & V(\theta_{\mathbf{k}})^\dagger & H^{-1}(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (5.20)$$

y mediante el algoritmo de decimación obtenemos

$$\mathcal{H}_F^{\text{eff}}(\mathbf{k}, 0, 0) = H^0(\mathbf{k}) + V(\theta_{\mathbf{k}})^\dagger G^1(0, 0) V(\theta_{\mathbf{k}}) + V(\theta_{\mathbf{k}}) G^{-1}(0, 0) V(\theta_{\mathbf{k}})^\dagger, \quad (5.21)$$

que puede ser escrito como el vector

$$\mathbf{h}_{0,0}(\mathbf{k}) = -2\eta^2 k_0 \hat{\mathbf{x}} + k \hat{\mathbf{z}}. \quad (5.22)$$

Utilizando la Ec. (5.14) que hace uso del vector $\mathbf{h}_{p,\beta}$ no rotado, podemos encontrar que $c_{0,0} = -1/2$ para cada valle K_+ y K_- , lo que da un total de -1 estados. Esta es la única contribución negativa al número de Chern y es de esperar que este

estado de borde una los valles K_{\pm} , como podemos comprobar en la Sección 3.3 y en la Fig. 3.7, incluso para frecuencias e intensidades muy altas. Para el caso de frecuencias muy altas ($\hbar\Omega > 1,5t$) no hay cruces de orden superior en ε_0 . Sin embargo, para frecuencias bajas, el cruce siguiente en $k_{1,0}$ también abre un gap de orden η^2 , por lo que las contribuciones $c_{0,0}$ y $c_{1,0}$ deben considerarse en conjunto.

En el punto $k_{0,0} = 0$ no podemos utilizar la base rotada, pero en el caso general de los cruces en $k_{p,0}$ ($p \geq 1$) podemos tomar los Hamiltonianos efectivos de la base rotada. Debemos decimar la réplica $n = 0$ para el cruce en $k_{1,0}$ entre las réplicas $m = -1$ y $n = 1$, por lo que el gap será de orden η^2 . El siguiente gap entre las réplicas $m = -2$ y $n = 2$ será de orden η^4 y así siguiendo. Evaluando los Hamiltonianos efectivos encontramos que

$$\begin{aligned}\tilde{h}_{1,0}(\mathbf{k}) &= \eta^2 \hat{\xi}_2 k_{1,0} \frac{1}{2} + (-k + k_{1,0}) \hat{z} \\ \tilde{h}_{2,0}(\mathbf{k}) &= \eta^4 \hat{\xi}_4 k_{2,0} \frac{1}{18} + (-k + k_{2,0}) \hat{z} \\ \tilde{h}_{3,0}(\mathbf{k}) &= \eta^6 \hat{\xi}_6 k_{3,0} \frac{9}{3200} + (-k + k_{3,0}) \hat{z} \\ &\dots,\end{aligned}\tag{5.23}$$

donde $\tilde{H}(\mathbf{k}, p, \beta) = \tilde{h}_{p,\beta}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} + \varepsilon_p \mathcal{I}$. A partir de los vectores de la Ec. (5.23) podemos utilizar la Ec. (5.15) para calcular la contribución al número de Chern de cada cruce y encontramos que

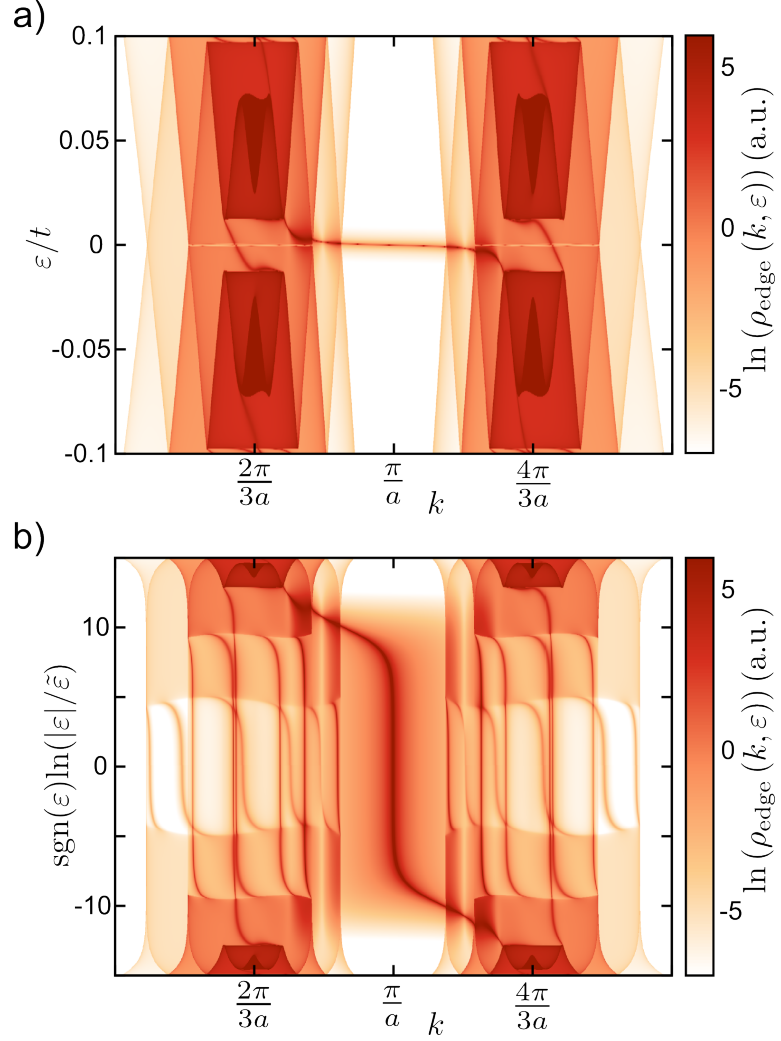
$$\begin{aligned}c_{1,0} &= 2 \\ c_{2,0} &= 4 \\ c_{3,0} &= 6 \\ &\dots,\end{aligned}\tag{5.24}$$

En la Fig. 5.5 vemos las bandas para una muestra semi-infinita de grafeno irradiado. En el panel (a) notamos que (i) el estado que une los valles K_+ y K_- no tiene la quiralidad opuesta, ya que las contribuciones $c_{0,0} = -1$ y $2c_{1,0} = 4$ son ambas contribuciones a un gap de orden η^2 . Esto hace que el número de winding efectivo en este orden sea la suma de ambas contribuciones por lo que obtenemos un total de 3 estados, (ii) los gaps en $k_{0,0}$ y $k_{1,0}$ son del mismo orden, siendo el primero del doble del ancho que el segundo, mientras que (iii) los gaps de órdenes más altos son apenas distinguibles. En el panel (b) expandimos logarítmicamente la escala de energías al rededor de ε_0 hasta una energía de corte $\tilde{\varepsilon}$ para poder discernir los gaps y los estados de orden superior, que concuerdan con la Ec. (5.24).

Tanto para los gaps en el borde de la zona de Floquet como centro de la zona de Floquet (excepto el gap en el punto de Dirac $\mathbf{k} = 0$), podemos expresar los Hamiltonianos efectivos en la base rotada como

$$\tilde{h}_{p,\beta}(\mathbf{k}) = \eta^{s_p^\beta} a_p^\beta k_0 \left[\cos(s_p^\beta \theta_k) \hat{x} + \sin(s_p^\beta \theta_k) \hat{y} \right] + (-k + s_p^\beta k_0) \hat{z} \tag{5.25}$$

Fig. 5.5: (a) Densidad local de estados cerca del borde de un plano semi-infinito de una red hexagonal irradiada con $\hbar\Omega = 0,2t$ y $z = 0,05$. En escala logarítmica de color el peso sobre la LDOS promedio $\rho_{\text{edge}}(k, \varepsilon)$, resuelta en energía ε y en el momento cristalino k paralelo al borde. (b) La escala de energía está expandida logarítmicamente respecto del centro del gap en ε_0 , hasta una energía mínima de corte $\tilde{\varepsilon} \approx 3t10^{-8}$. En (a) y (b) observamos que las réplicas de Floquet de orden alto se corresponden con un peso sobre la LDOS media de orden más alto, mientras que los gaps de orden superior se distinguen en el panel (b) junto con los estados de borde asociados. *Figura adaptada de [88]*



¶ Para mantener la expresión en su versión más simple, descartamos las contribuciones de orden $\mathcal{O}(\eta^2)$ a la componente z del vector $\mathbf{h}_{p,\beta}$. Estas correcciones provienen de la renormalización de las réplicas y no modifican el resultado de la integral de la contribución al número de Chern.

donde $s_p^\beta = 2(p + \beta)$, $\theta_{\mathbf{k}} = \tan^{-1}(k_y/k_x)$ y a_p^β es un factor numérico ¶.

Usando la Ec. (5.15), donde el primer término es nulo (excepto para $\mathbf{h}_{0,0}$), obtenemos que la contribución al número de Chern es

$$c_{p,\beta} = \frac{s_p^\beta}{2} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{(\eta^{s_p^\beta} a_p^\beta / s_p^\beta)^2 + 1}} \right), \quad (5.26)$$

la cual representa el caso general para cualquier orden de gap tanto en ε_0 como en $\varepsilon_{1/2}$. Si tomamos el límite en que $\eta \rightarrow 0$, las aproximaciones hechas hasta ahora se vuelven exactas y las contribuciones son

$$c_{p,\beta} = s_p^\beta. \quad (5.27)$$

La Ec. (5.27) es el resultado central de esta Sección y puede entenderse fácilmente si recordamos que la contribución al número de Chern debe ser igual al número de veces que el vector $\tilde{\mathbf{h}}_{p,\beta}$ gira en el plano (x, y) en torno al eje z mientras \mathbf{k} explora la primera zona de Brillouin ¶. En general $s_p^{\beta+1} = 2 + s_p^\beta$, como podemos comprobar

¶ Por ejemplo para el gap en ε_0 , los valores que toma s_p^0 son $s_1^0 = 2$, $s_2^0 = 4$, $s_3^0 = 6$ y así siguiendo; mientras que los valores que toma $s_p^{1/2}$ son $s_0^{1/2} = 1$, $s_1^{1/2} = 3$, $s_2^{1/2} = 5$.

en las Figs. 5.4 y 5.5, donde cada gap de orden superior tiene +2 estados.

5.2. Mapa de transiciones de fases topológicas

El método de los Hamiltonianos efectivos de la Sección 5.1 describe correctamente las contribuciones al número de Chern, incluso más allá del rango de validez del método $k \cdot p$ en el que está basado. Esto se debe a que el método $k \cdot p$ describe correctamente la topología (su textura de pseudospin) de las bandas a energías por debajo de la singularidad de van Hove $|\varepsilon| < 1 t \approx 2,7 \text{ eV}$.

5.2.1. Frecuencias intermedias e intensidades altas

Cuando la frecuencia es más alta $\hbar\Omega \sim \Delta$, donde Δ es el ancho de banda, hay menos solapamientos de las distintas réplicas de Floquet, lo que significa que hay menos procesos inelásticos debido al alto costo energético. Este régimen es por lo tanto más simple de describir que el caso tratado en la Sección anterior (5.1), sin embargo surgen otras dificultades. Cuando aumentamos la frecuencia el número de réplicas bien descritas por la aproximación de bajas frecuencias rápidamente decrece y debemos recurrir al método tight-binding y hacer el cálculo explícito. Este cálculo se basa en el Hamiltoniano de Floquet truncado a un número de réplicas entre $\pm M$ **. Entonces, debemos incluir al menos todas las réplicas que se solapen con la primera zona de Floquet, de modo que $M_{\min} = \text{int}(\Delta/\hbar\Omega)$ †† .

A medida que aumenta la intensidad, los procesos inelásticos de orden más alto se incrementan y el peso de las autofunciones del Hamiltoniano de Floquet se distribuyen en un mayor número de réplicas. Como consecuencia debemos tomar un número mayor de réplicas para describir correctamente el espectro dentro de la primera zona de Floquet. El número de réplicas suficientes estará dado por el número de réplicas necesarias para que el cálculo del número de Chern de las bandas centrales converja. Por ejemplo en la Fig. 5.2 debemos incluir 5 réplicas de Floquet, a pesar de que $\Delta/\hbar\Omega < 3$. Vemos cómo cambia el número de estados por gap (en los gaps fuera de la primera zona de Floquet $(-\hbar\Omega/2, \hbar\Omega/2)$) a medida que nos acercamos a la réplica central. Las bandas centrales son la mejor aproximación al espectro del Hamiltoniano de Floquet no truncado, dentro de la primera zona de Floquet.

El aumento de procesos inelásticos favorecido por el aumento de la intensidad de la radiación, conllevan a nuevas transiciones de fase (ver Figs. 5.6 y 5.7), como resultado de la distribución de las autofunciones en muchas réplicas de Floquet.

5.2.2. Transiciones de fase topológicas al variar frecuencia e intensidad de la radiación

En la sección anterior, observamos nuevas contribuciones al número de Chern cada vez que incluíamos un proceso fotónico de orden más alto, asociado a un gap

** Como vimos en la Ec. (5.14) el cómputo del número de Chern depende de los autovectores del Hamiltoniano integrados sobre (un muestreo) de la zona de Brillouin, por lo que es necesario disminuir lo más posible la dimensión del Hamiltoniano.

†† Debemos recordar que en nuestro caso, el ancho de banda Δ disminuye en función de la intensidad de radiación como $6 t J_0(z)$, ver Apéndice A.1.

de ese orden. En cambio en el régimen de altas frecuencias, el número de réplicas que se solapan está dado por la frecuencia de la radiación y podemos calcular explícitamente los números de Chern cuya suma es el número de winding, a medida que variamos la frecuencia e intensidad de la radiación.

A intensidad nula ($z = 0$), el ancho de banda $\Delta = 6t$ de la n -ésima réplica ($n > 0$) se encuentra a energías entre $n\hbar\Omega \pm 3t$, por lo que se solapará con las demás réplicas de Floquet en $\varepsilon_0 = 0$ cuando

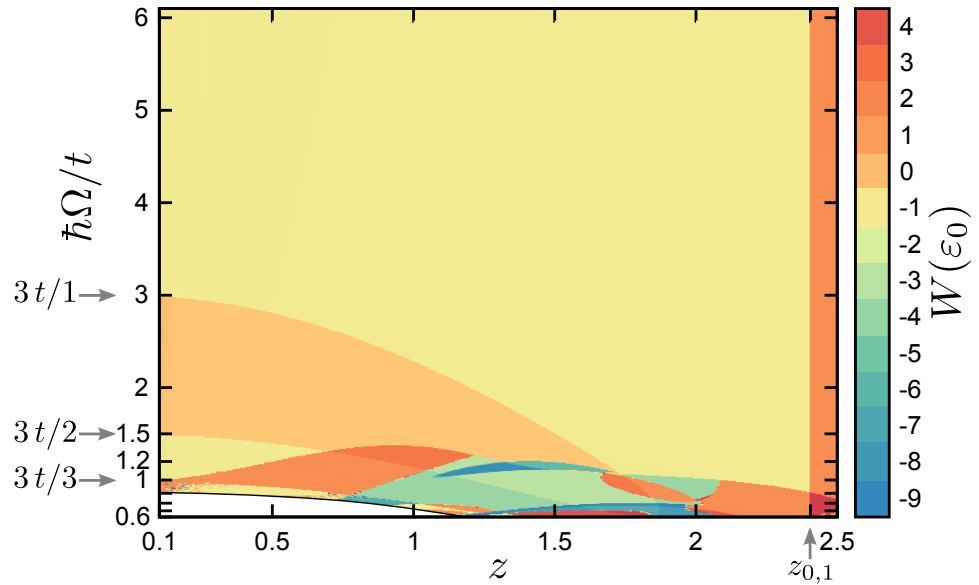
$$\hbar\Omega < 3t/n, \quad (5.28)$$

y en $\varepsilon_{1/2} = \hbar\Omega/2$ cuando

$$\hbar\Omega < 3t/(n - \frac{1}{2}). \quad (5.29)$$

A medida que bajamos la frecuencia, más réplicas se solapan y los nuevos solapamientos producen posibles transiciones de fase. Cuando la intensidad es baja, el ancho de banda de las réplicas se reduce aproximadamente como $tJ_0(z) \approx t(1 - z^2)$, por lo que en las Figs. 5.6 y 5.7 vemos líneas de transición de fase como parábolas hacia abajo, que nacen a las frecuencias de indicadas por la Ec. (5.28) en la Fig. 5.6 y por la Ec. (5.29) en la Fig. 5.7. Cabe aclarar que no todos los solapamientos producen una transición, por ejemplo en la Fig. 5.7 a $\hbar\Omega = 3t(2 - \frac{1}{2})$, pero sí producen un cierre y reapertura del gap correspondiente a medida que bajamos la frecuencia.

Fig. 5.6: Número total de estados de borde dentro del gap en $\varepsilon_0 = 0$, representados por el número de winding $W(\varepsilon_0)$ (en escala de color) al variar la frecuencia $\hbar\Omega$ e intensidad z de la radiación. A bajas intensidades, al disminuir la frecuencia nuevos solapamientos entre réplicas de Floquet ocurren cada vez que $\hbar\Omega = 3t/m$ con m entero (como se indicado) y marcan una línea de transiciones topológicas. A intensidades mayores los hoppings entre réplicas crecen y nuevas transiciones ocurren, mientras que los hoppings dentro de la misma réplica disminuyen hasta cero en el valor crítico $z_{0,1}$, el primer cero de $J_0(z)$. Figura adaptada de [88].



El análisis anterior se basa en el hecho de que los acoples entre la n -ésima réplica y la m -ésima réplica son proporcionales a $tJ_{n-m}(z)$, que a intensidades bajas $\approx tz^{|n-m|}$. Luego, los principales acoples son entre sitios que pertenecen a la misma réplica. A medida que aumenta la intensidad, la dependencia de funciones de Bessel $J_{n-m}(z)$ hace que esta aproximación deje de ser válida y el acople entre

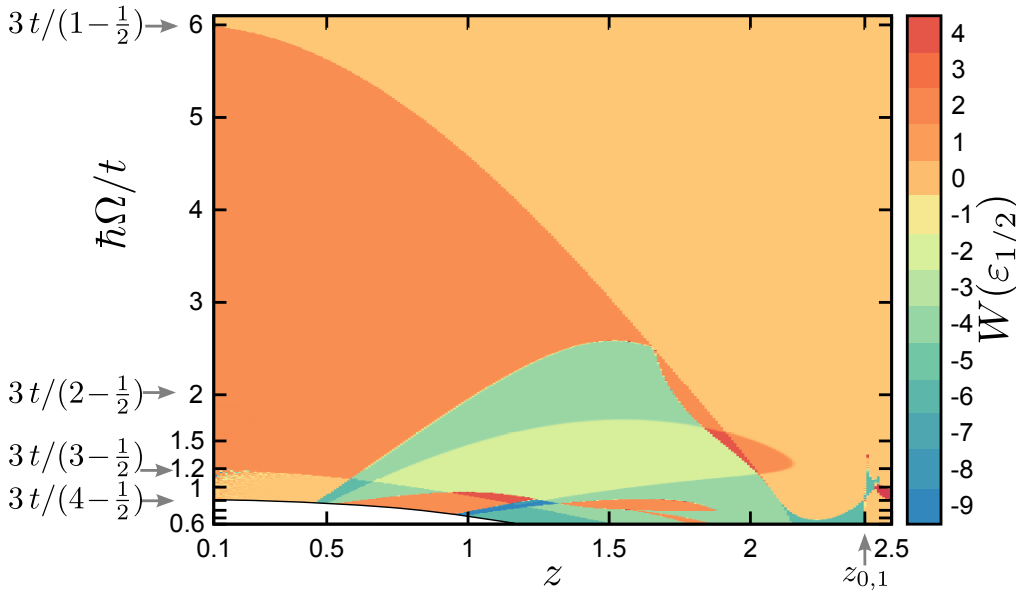


Fig. 5.7: Número total de estados de borde dentro del gap en $\varepsilon_{1/2} = \hbar\Omega/2$, representados por el número de winding $W(\varepsilon_{1/2})$ (en escala de color) al variar la frecuencia $\hbar\Omega$ e intensidad z de la radiación. A bajas intensidades, al disminuir la frecuencia nuevos solapamientos entre réplicas de Floquet ocurren cada vez que $\hbar\Omega = 3t/(m - 1/2)$ con m entero (como se indicado) y marcan una posible línea de transiciones topológicas. A intensidades mayores los hoppings entre réplicas crecen y nuevas transiciones ocurren, mientras que los hoppings dentro de la misma réplica disminuyen hasta cero en el valor crítico $z_{0,1}$, el primer cero de $J_0(z)$. *Figura adaptada de [88].*

sitios vecinos pero de réplicas aledañas pase a ser incluso mayor que los hoppings dentro de la misma réplica, como vemos en la Fig. 5.8. A medida que aumenta la intensidad, los efectos de introducir una nueva réplica en el cálculo, se extienden mucho más allá del ancho de banda de esa réplica y se generan nuevas transiciones de fase. Estas son las líneas de transición de pendiente positiva en las Figs. 5.6 y 5.7.

Un caso extremo ocurre cuando se anulan los hoppings dentro de la misma réplica, proporcionales a $t J_0(z)$. El desvanecimiento del acople dentro de la misma réplica se da cuando la intensidad es $z_{0,1} = 2,4048$, el primer cero de la función de Bessel $J_0(z)$. A la intensidad $z_{0,1}$ una línea vertical en las Figs. 5.6 y 5.7 marca la aparición de transiciones de fase en ambos gaps para todas las frecuencias. A esta intensidad una pequeña desviación de la polarización circular hacia polarización elíptica puede generar transiciones de fase en el punto de Dirac [38], por lo que es una región altamente inestable del mapa de fases. Durante la finalización de esta tesis, un trabajo reciente [89] estudia las transiciones de fase con una aproximación de Hamiltonianos efectivos para frecuencias altas y logran explicar transiciones que se observan para intensidades extremadamente altas y frecuencias altas. Además presentan un mapa de transiciones para un rango más grande de parámetros que en esta tesis hemos descartado por consideraciones físicas de factibilidad. El ruido numérico que se observa para bajas intensidades en las Figs. 5.6 y 5.6 se debe a la inestabilidad del cálculo de la integral de la curvatura de Berry cuando la amplitud de los gaps es muy pequeña. Además, puede observarse ruido cerca de las transiciones de fase ya que cada línea de transición marca el cierre de un gap.

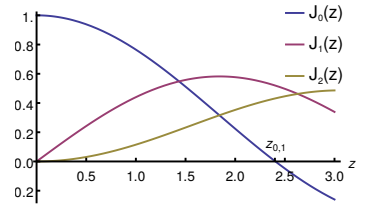


Fig. 5.8: Funciones de Bessel de orden 0, 1 y 2. El primer cero de $J_0(z)$ se indica por $z_{0,1} \approx 2,4048$.

5.3. Contribuciones originales

- Revelar la jerarquía anidada de gaps y de estados topológicos asociados a estos gaps, que están paraméricamente separados por su peso o contribución a la

densidad de estados promediada en el tiempo. El método de los Hamiltonianos efectivos presentado en la Sección 5.1 tiene la ventaja de dar cuenta de los primeros órdenes de gaps y estados topológicos, que son las contribuciones más importantes a la densidad de estados promedio.

- El mapa de transiciones de fase topológica de Floquet en la Sección 5.2 muestra cómo obtener distintos números de estados tanto en el gap dinámico como en el gap del punto de Dirac, mostrando la riqueza de la topología de las bandas de Floquet cuando la frecuencia es baja.
- Los dos métodos presentados para describir la topología de las bandas de Floquet logran describir las múltiples transiciones topológicas de un sistema tipo Dirac para frecuencias de bajas a intermedias y para un amplio rango de intensidades.

CAPÍTULO 6

CONCLUSIONES

Contenidos

6.1. Principales Contribuciones Originales	77
6.2. Perspectivas en el campo de esta tesis	79
6.2.1. Clasificación topológica de sistemas periódicos	79
6.2.2. El problema de la ocupación de los estados de Floquet	79
6.2.3. Realización experimental	80
6.3. Trabajos derivados de esta tesis	81

Abstract

En este capítulo se presenta un resumen de las principales contribuciones derivadas del trabajo de tesis. Por otra parte, presentamos también una breve discusión de algunas de los problemas que aún quedan por resolver y que están siendo investigados actualmente.

6.1. Principales Contribuciones Originales

- En el Capítulo 2 presentamos **un estudio exhaustivo sobre los efectos de la radiación de en nanocintas de grafeno**. Primero, estudiamos grafeno bulk bajo la incidencia de radiación de polarización circular y vemos que abre gaps en la densidad de estados promediada en el tiempo y que la polarización lineal no abre gaps aunque sí disminuye la densidad de estados media. En particular, demostramos que existen distintos mecanismos de transiciones electrónicas habilitados o inhabilitados según la dirección de la polarización y la terminación de la nanocinta. **El interjuego entre la dirección de la polarización lineal de un láser y el confinamiento electrónico dentro de las nanocintas de grafeno nos da un parámetro externo de control sobre gaps fuera del punto de Dirac**. La dirección de polarización respecto del borde de la nanocinta es el parámetro de control que permite o inhibe las transiciones *intra-modo* o *inter-modo* en cintas de terminación zigzag o armchair.
- La radiación de polarización circular rompe la simetría de reversión temporal y abre gaps tanto en el punto de Dirac como en el borde de la zona de Floquet y

ambos gaps son no triviales. En el Capítulo 3 **presentamos las primeras simulaciones atomísticas que evidencian los gaps y los estados topológicos de borde y presentamos la primera solución analítica a los estados topológicos de Floquet en grafeno irradiado**. Estos resultados están apoyados por el cálculo explícito de las propiedades topológicas de las bandas de Floquet que muestra la existencia de estados de borde quirales. Verificamos la quiralidad de los estados de borde con cálculos de transporte local dentro de una nanocinta irradiada.

- En el Capítulo 4 **presentamos los primeros cálculos de transporte multiterminal de un aislante topológico de Floquet. La conductancia Hall calculada en un esquema de scattering muestra que eventualmente se puede llegar a una cuantización donde los estados de borde relevantes son aquellos con peso significativo sobre la densidad de estados media**. Esto distingue a los aislantes topológicos de Floquet de los aislantes topológicos estáticos. En ambos casos la topología del bulk se refleja en la cantidad y quiralidad de los estados de borde (correspondencia volumen/superficie), aunque no todos los estados participan en el transporte multiterminal con cables no irradiados.
- Finalmente, vemos que más allá de las aproximaciones a primer orden, existen estados topológicos en una estructura de bandas de creciente complejidad a medida que bajamos la frecuencia de la radiación. En el Capítulo 5 **analizamos en detalle el régimen de bajas frecuencias y damos un método constructivo para obtener las propiedades topológicas de las bandas de Floquet**. Cuando la frecuencia es muy baja, la zona de Floquet es muy pequeña y el espectro de Floquet involucra pliegues del espectro original, con mayor número de pliegues a menor frecuencia. Por lo tanto en el límite $\hbar\Omega \ll \Delta$ es altamente desafiante conseguir una caracterización completa de la topología de las bandas de Floquet. En el régimen de bajas frecuencias obtenemos Hamiltonianos efectivos, que caracterizan las contribuciones al invariante topológico y describen el cruce entre las distintas réplicas de Floquet. Con este método constructivo **vemos que se agregan estados de borde a medida que consideramos un mayor número de réplicas. Estos gaps se ordenan en una jerarquía indexada por el número de procesos fotónicos que originan el gap, en una estructura anidada de gaps y estados topológicos asociados**. El régimen de frecuencias intermedias es analizado con el esquema de zonas repetidas de Floquet [36], con el que podemos calcular explícitamente el invariante topológico de cada banda de Floquet. A partir de este esquema obtenemos un mapa de transiciones de fase topológica para un amplio rango de frecuencias e intensidades de radiación de polarización circular sobre grafeno. Con los dos métodos de Hamiltonianos efectivos para frecuencias bajas y el cálculo directo del invariante topológico para frecuencias intermedias, caracterizamos de manera más precisa la topología de las bandas de Floquet del grafeno irradiado.

Los resultados obtenidos durante el desarrollo del trabajo de tesis han dado lugar a 7 publicaciones en revistas internacionales, que han colectado más de 100 citas el momento de la presentación de esta tesis. Esto refleja el impacto de nuestro trabajo como también, el gran crecimiento del área y el interés hacia las propiedades de transporte en grafeno y aislantes topológicos de Floquet.

6.2. Perspectivas en el campo de esta tesis

6.2.1. Clasificación topológica de sistemas periódicos

La primera aproximación para clasificar la topología de los aislantes topológicos de Floquet es utilizar los invariantes topológicos heredados del caso estático. Si observamos la evolución a estroboscópica del sistema a tiempos nT , donde T es el periodo del potencial, esta evolución puede ser descrita por un Hamiltoniano efectivo independiente del tiempo. Podemos calcular el Hamiltoniano efectivo para frecuencias altas [30] y describir la topología de este Hamiltoniano al igual que en el caso estático.

En un caso más general, para cualquier frecuencia, podemos definir un invariante que caracteriza la topología de sistemas bidimensionales forzados periódicamente mediante el número de winding [36]. El número de winding es equivalente a la suma de los números de Chern de las bandas de un espectro de Floquet truncado, sin embargo también puede obtenerse de los autovalores del operador evolución temporal.

Cuando además imponemos la conservación de algunas simetrías, es posible que sea necesario un nuevo invariante topológico. Por ejemplo cuando exigimos la conservación de la simetría de reversión temporal, el invariante topológico que describe el sistema debe ser de tipo \mathbf{Z}_2 . En la Ref. [63] los autores definen un invariante de este tipo, que se relaciona con el índice de Kane-Mele, al igual que el número de winding se relaciona con el número de Chern.

Los últimos resultados en el área muestran que además de los invariantes definidos anteriormente, puede que debamos sumar contribuciones en el caso que existan singularidades en el espectro del operador evolución a tiempos menores que el período del potencial [62]. La caracterización completa de la topología de los aislantes topológicos de Floquet aun no está concluida y sigue siendo un tema activo de investigación.

6.2.2. El problema de la ocupación de los estados de Floquet

La ocupación de los estados de no equilibrio en un sistema sujeto a un potencial periódico en el tiempo, es una cuestión altamente desafiante. De hecho, para poder hablar de un aislante en el sentido usual deberíamos poder establecer primero las ocupaciones de manera de tener ocupados todos los estados de un conjunto de bandas dejando un gap para excitaciones. En el desarrollo del campo de los llamados

aislantes topológicos de Floquet, la analogía llega hasta la definición de estados de una partícula similares a los encontrados en aislantes topológicos. El problema surge al intentar ocuparlos ya que la determinación de estas ocupaciones depende en general del setup experimental y los mecanismos de disipación presentes en el material. Este es un tema debatido actualmente con diferentes propuestas que mencionamos brevemente a continuación.

Para empezar, podemos imaginarnos la evolución temporal del sistema, partiendo de un estado de equilibrio y luego encendiendo el potencial periódico hasta llegar al régimen estacionario. La conexión entre los estados de equilibrio iniciales y los estados estacionarios de Floquet no es directa y se ha demostrado que algunos estados de Floquet pueden ser no accesibles dependiendo de las ocupaciones del estado inicial y del protocolo de encendido del potencial [67, 75, 90] –aunque en presencia de interacciones el estado estacionario a tiempos largos es independiente del estado inicial [73]. Por otro lado, se argumenta que ante evolución unitaria no podemos cambiar la topología del estado bulk inicial, aunque en presencia de bordes el invariante topológico correcto (el índice de Bott) sí puede cambiar [68].

En los sistemas forzados de Floquet el potencial periódico «inyecta» energía continuamente al sistema. Si el sistema está aislado la ocupación de los estados tiende a la máxima entropía y el sistema se calienta hasta infinito [68]. Esta idealización es poco alentadora para la realización de los aislantes topológicos de Floquet en materia condensada, aunque al incluir otros mecanismos como interacciones de muchos cuerpos podemos probar que el sistema se estabiliza [69].

Deben encontrarse nuevos argumentos termodinámicos para definir las ocupaciones de los sistemas de Floquet, ya que no podemos aplicar directamente los argumentos para obtener la función de ocupación [67], principalmente porque el espectro de Floquet es no acotado. Al conectar el sistema a reservorios térmicos [70] e incluir los mecanismos de disipación (interacciones electrón-fonón, recombinación radiativa, emisión de fotones, scattering asistido por fotones) que entren en juego en el setup del sistema, podemos definir la ocupación de los estados de Floquet. Sin embargo, en general se observan excitaciones en el sistema aún cuando está conectado a reservorios bosónicos o fermiónicos de temperatura cero. Algunas aproximaciones proponen hacer una ingeniería del baño térmico para garantizar un estado estacionario donde sólo una banda de Floquet esté ocupada [71, 72], sintonizando apropiadamente los mecanismos de disipación, las propiedades de los reservorios térmicos y la configuración de acople entre el sistema forzado y el reservorio.

6.2.3. Realización experimental

En fotónica ya se ha reportado la realización de los aislantes topológicos de Floquet [40, 41]. En átomos fríos se ha llegado a simular el modelo de Haldane [91]. El Hamiltoniano del modelo de Haldane es análogo al Hamiltoniano efectivo para grafeno a frecuencias mucho más grandes que el ancho de banda [30]. Los hoppings

a segundos vecinos del modelo de Haldane son análogos, en el contexto de grafeno irradiado, a absorciones y reemisión de fotones.

En materia condensada el primer experimento es el de Wang y col. [39], donde se abren los gaps en el espectro de Floquet-Bloch en la superficie de un aislante topológico tridimensional. A través de la técnica de "pump and probe", se observa la relación de dispersión mediante ARPES para diferentes polarizaciones. Las excitaciones electrónicas son de tipo Dirac al igual que en grafeno y se observan gaps que dependen de la polarización en los cruces evitados, mientras que la radiación de polarización circular induce además un gap en el punto de Dirac.

6.3. Trabajos derivados de esta tesis

1. H. L. Calvo y col. «Laser-induced effects on the electronic features of graphene nanoribbons Laser-induced effects on the electronic features of graphene nanoribbons». En: *Applied Physics Letters* 101.25 (2012), 253506(4). DOI: [10.1063/1.4772496](https://doi.org/10.1063/1.4772496). URL: <http://scitation.aip.org/content/aip/journal/apl/101/25/10.1063/1.4772496>
2. H. L. Calvo y col. «Non-perturbative effects of laser illumination on the electrical properties of graphene nanoribbons». En: *Journal of Physics: Condensed Matter* 25.14 (abr. de 2013), pág. 144202. DOI: [10.1088/0953-8984/25/14/144202](https://doi.org/10.1088/0953-8984/25/14/144202). URL: <http://stacks.iop.org/0953-8984/25/i=14/a=144202>
3. P. M. Perez-Piskunow y col. «Floquet chiral edge states in graphene». En: *Physical Review B* 89.12 (mar. de 2014), 121401(R). DOI: [10.1103/PhysRevB.89.121401](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.89.121401). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.89.121401>
4. G. Usaj y col. «Irradiated graphene as a tunable Floquet topological insulator». En: *Physical Review B* 90.11 (sep. de 2014), pág. 115423. DOI: [10.1103/PhysRevB.90.115423](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.115423). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.90.115423>
5. L. E. F. Foa Torres y col. «Multiterminal Conductance of a Floquet Topological Insulator». En: *Physical Review Letters* 113.26 (dic. de 2014), pág. 266801. DOI: [10.1103/PhysRevLett.113.266801](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.113.266801). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.113.266801>
6. P. M. Perez-Piskunow, L. E. F. Foa Torres y G. Usaj. «Hierarchy of Floquet gaps and edge states for driven honeycomb lattices». En: *Physical Review A* 91.4 (abr. de 2015), pág. 043625. DOI: [10.1103/PhysRevA.91.043625](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.91.043625). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.91.043625>
7. H. L. Calvo y col. «Floquet interface states in illuminated three-dimensional topological insulators». En: *Physical Review B* 91.24 (jun. de 2015), 241404(R). DOI: [10.1103/PhysRevB.91.241404](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.241404). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.91.241404>

BIBLIOGRAFÍA

- [1] K. S. Novoselov, a. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva y a. a. Firsov. «Electric field effect in atomically thin carbon films.» En: *Science (New York, N.Y.)* 306.5696 (oct. de 2004), págs. 666-9. DOI: [10.1126/science.1102896](https://doi.org/10.1126/science.1102896). URL: <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/15499015>.
- [2] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos y A. A. Firsov. «Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene». En: *Nature* 438.7065 (nov. de 2005), págs. 197-200. DOI: [10.1038/nature04233](https://doi.org/10.1038/nature04233). URL: <http://www.nature.com/doi/10.1038/nature04233>.
- [3] M. V. Berry y A. K. Geim. «Of flying frogs and levitrons». En: *European Journal of Physics* 18.4 (jul. de 1997), págs. 307-313. DOI: [10.1088/0143-0807/18/4/012](https://doi.org/10.1088/0143-0807/18/4/012). URL: <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/0143-0807/18/4/012/meta>.
- [4] L. E. F. Foa Torres, S. Roche y J. C. Charlier. *Introduction to Graphene-Based Nanomaterials: From Electronic Structure to Quantum Transport*. Cambridge University Press, 2014. URL: <http://www.cambridge.org/9781107030831>.
- [5] P. R. Wallace. «The Band Theory of Graphite». En: *Phys. Rev.* 71.9 (mayo de 1947), págs. 622-634. DOI: [10.1103/PhysRev.71.622](https://doi.org/10.1103/PhysRev.71.622). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.71.622>.
- [6] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov y A. K. Geim. «The electronic properties of graphene». En: *Reviews of Modern Physics* 81.1 (ene. de 2009), págs. 109-162. DOI: [10.1103/RevModPhys.81.109](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.81.109). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.81.109>.
- [7] A. Calogeracos y N. Dombey. «History and physics of the Klein paradox». En: *Contemporary Physics* 40.5 (sep. de 1999), págs. 313-321. DOI: [10.1080/001075199181387](https://doi.org/10.1080/001075199181387). URL: <http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/001075199181387>.
- [8] V. Cheianov y V. Fal'ko. «Selective transmission of Dirac electrons and ballistic magnetoresistance of n-p junctions in graphene». En: *Physical Review B* 74.4 (jul. de 2006), pág. 041403. DOI: [10.1103/PhysRevB.74.041403](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.74.041403). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.74.041403>.

- [9] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov y A. K. Geim. «Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene». En: *Nature Physics* 2.9 (sep. de 2006), págs. 620-625. DOI: [10.1038/nphys384](https://doi.org/10.1038/nphys384). URL: <http://www.nature.com/doi/10.1038/nphys384>.
- [10] N. M. Gabor, J. C. W. Song, Q. Ma, N. L. Nair, T. Taychatanapat, K. Watanabe, T. Taniguchi, L. S. Levitov y P. Jarillo-Herrero. «Hot carrier-assisted intrinsic photoresponse in graphene.» En: *Science (New York, N.Y.)* 334.6056 (nov. de 2011), págs. 648-52. DOI: [10.1126/science.1211384](https://doi.org/10.1126/science.1211384). URL: <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/21979935>.
- [11] J. Niu, Y. Jun Shin, Y. Lee, J.-H. Ahn y H. Yang. «Graphene induced tunability of the surface plasmon resonance». En: *Applied Physics Letters* 100.6 (2012), pages. DOI: <http://dx.doi.org/10.1063/1.3683534>. URL: <http://scitation.aip.org/content/aip/journal/apl/100/6/10.1063/1.3683534>.
- [12] Y.-M. Bahk, G. Ramakrishnan, J. Choi, H. Song, G. Choi, Y. H. Kim, K. J. Ahn, D.-S. Kim y P. C. M. Planken. «Plasmon Enhanced Terahertz Emission from Single Layer Graphene». En: *ACS Nano* 8.9 (2014), págs. 9089-9096. DOI: [10.1021/nn5025237](https://doi.org/10.1021/nn5025237). URL: <http://dx.doi.org/10.1021/nn5025237>.
- [13] J. Chen y col. «Optical nano-imaging of gate-tunable graphene plasmons». En: *Nature advance on* (jun. de 2012), pages. DOI: [10.1038/nature11254](https://doi.org/10.1038/nature11254). URL: <http://www.nature.com/doi/10.1038/nature11254>.
- [14] F. H. L. Koppens, D. E. Chang y F. J. Garcia de Abajo. «Graphene Plasmonics: A Platform for Strong Light-Matter Interactions». En: *Nano Lett.* 11.8 (jul. de 2011), págs. 3370-3377. DOI: [10.1021/nl201771h](https://doi.org/10.1021/nl201771h). URL: <http://dx.doi.org/10.1021/nl201771h>.
- [15] F. Xia, T. Mueller, Y.-M. Lin, A. Valdes-Garcia y P. Avouris. «Ultrafast graphene photodetector». En: *Nature Nanotechnology* 4.12 (dic. de 2009), págs. 839-843. DOI: [10.1038/nnano.2009.292](https://doi.org/10.1038/nnano.2009.292). URL: <http://www.nature.com/doi/10.1038/nnano.2009.292>.
- [16] F. H. L. Koppens, T. Mueller, P. Avouris, A. C. Ferrari, M. S. Vitiello y M. Polini. «Photodetectors based on graphene, other two-dimensional materials and hybrid systems». En: *Nature Nanotechnology* 9.10 (oct. de 2014), págs. 780-793. DOI: [10.1038/nnano.2014.215](https://doi.org/10.1038/nnano.2014.215). URL: <http://www.nature.com/doi/10.1038/nnano.2014.215>.
- [17] H. A. Hafez y col. «Nonlinear transmission of an intense terahertz field through monolayer graphene». En: *AIP Advances* 4.11 (2014), pages. DOI: <http://dx.doi.org/10.1063/1.4902096>. URL: <http://scitation.aip.org/content/aip/journal/adv/4/11/10.1063/1.4902096>.
- [18] M. Freitag, T. Low, F. Xia y P. Avouris. «Photoconductivity of biased graphene». En: *Nature Photonics* 7.1 (dic. de 2012), págs. 53-59. DOI: [10.1038/nphoton.2012.314](https://doi.org/10.1038/nphoton.2012.314). URL: <http://www.nature.com/doi/10.1038/nphoton.2012.314>.

- [19] K. Gerasimos, M. Badioli, L. Gaudreau, J. Osmond, M. Bernechea, P. de Arquer F., F. Gatti y F. H. L. Koppens. «Hybrid graphene-quantum dot phototransistors with ultrahigh gain». En: *Nat Nano* 7.6 (jun. de 2012), págs. 363-368. DOI: <http://dx.doi.org/10.1038/nnano.2012.60>. URL: <http://www.nature.com/nnano/journal/v7/n6/abs/nnano.2012.60.html>.
- [20] K. v. Klitzing, G. Dorda y M. Pepper. «New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance». En: *Physical Review Letters* 45.6 (ago. de 1980), págs. 494-497. DOI: [10.1103/PhysRevLett.45.494](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.45.494). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.45.494>.
- [21] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale y M. den Nijs. «Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential». En: *Physical Review Letters* 49.6 (ago. de 1982), págs. 405-408. DOI: [10.1103/PhysRevLett.49.405](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.49.405). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.49.405>.
- [22] R. B. Laughlin. «Quantized Hall conductivity in two dimensions». En: *Physical Review B* 23.10 (mayo de 1981), págs. 5632-5633. DOI: [10.1103/PhysRevB.23.5632](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.23.5632). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.23.5632>.
- [23] C. L. Kane y E. J. Mele. «Quantum Spin Hall Effect in Graphene». En: *Physical Review Letters* 95.22 (nov. de 2005), pág. 226801. DOI: [10.1103/PhysRevLett.95.226801](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.95.226801). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.95.226801>.
- [24] S. V. Syzranov, M. V. Fistul y K. B. Efetov. «Effect of radiation on transport in graphene». En: *Physical Review B* 78.4 (jul. de 2008), pág. 045407. DOI: [10.1103/PhysRevB.78.045407](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.78.045407). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.78.045407>.
- [25] Z. Gu, H. a. Fertig, D. P. Arovas y A. Auerbach. «Floquet Spectrum and Transport through an Irradiated Graphene Ribbon». En: *Phys. Rev. Lett.* 107.21 (nov. de 2011), págs. 216601-. DOI: [10.1103/PhysRevLett.107.216601](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.107.216601). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.107.216601>.
- [26] E. Prada, P. San-Jose y H. Schomerus. «Quantum pumping in graphene». En: *Phys. Rev. B* 80.24 (dic. de 2009), pág. 245414. DOI: [10.1103/PhysRevB.80.245414](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.245414). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.80.245414>.
- [27] L. E. F. Foa Torres, H. L. Calvo, C. G. Rocha y G. Cuniberti. «Enhancing single-parameter quantum charge pumping in carbon-based devices». En: *Applied Physics Letters* 99.9 (ago. de 2011), pág. 092102. DOI: [10.1063/1.3630025](https://doi.org/10.1063/1.3630025). URL: <http://scitation.aip.org/content/aip/journal/apl/99/9/10.1063/1.3630025>.
- [28] M. M. Glazov y S. D. Ganichev. «High frequency electric field induced nonlinear effects in graphene». En: *Physics Reports* 535.3 (feb. de 2014), págs. 101-138. DOI: [10.1016/j.physrep.2013.10.003](https://doi.org/10.1016/j.physrep.2013.10.003). URL: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0370157313003785>.

- [29] O. V. Kibis. «Metal-insulator transition in graphene induced by circularly polarized photons». En: *Phys. Rev. B* 81.16 (abr. de 2010), págs. 165433-. DOI: [10.1103/PhysRevB.81.165433](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.165433). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.81.165433>.
- [30] T. Oka y H. Aoki. «Photovoltaic Hall effect in graphene». En: *Physical Review B* 79.8 (feb. de 2009), pág. 081406. DOI: [10.1103/PhysRevB.79.081406](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.081406). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.79.081406>.
- [31] D. S. L. Abergel y T. Chakraborty. «Generation of valley polarized current in bilayer graphene». En: *Applied Physics Letters* 95.6 (ago. de 2009), pág. 062107. DOI: [10.1063/1.3205117](https://doi.org/10.1063/1.3205117). URL: <http://scitation.aip.org/content/aip/journal/apl/95/6/10.1063/1.3205117>.
- [32] H. L. Calvo, H. M. Pastawski, S. Roche y L. E. F. Foa Torres. «Tuning laser-induced band gaps in graphene». En: *Appl. Phys. Lett.* 98.23 (jun. de 2011), pág. 232103. DOI: [10.1063/1.3597412](https://doi.org/10.1063/1.3597412). URL: <http://dx.doi.org/10.1063/1.3597412>.
- [33] M. Tahir, A. Manchon y U. Schwingenschlögl. «Photoinduced quantum spin and valley Hall effects, and orbital magnetization in monolayer MoS₂». En: *Phys. Rev. B* 90.12 (sep. de 2014), pág. 125438. DOI: [10.1103/PhysRevB.90.125438](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.125438). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.90.125438>.
- [34] P. M. Perez-Piskunow, G. Usaj, C. a. Balseiro y L. E. F. F. Torres. «Floquet chiral edge states in graphene». En: *Physical Review B* 89.12 (mar. de 2014), 121401(R). DOI: [10.1103/PhysRevB.89.121401](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.89.121401). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.89.121401>.
- [35] N. H. Lindner, G. Refael y V. Galitski. «Floquet topological insulator in semiconductor quantum wells». En: *Nature Physics* 7.6 (jun. de 2011), págs. 490-495. DOI: [10.1038/nphys1926](https://doi.org/10.1038/nphys1926). URL: <http://dx.doi.org/10.1038/nphys1926%20http://www.nature.com/doi/10.1038/nphys1926>.
- [36] M. S. Rudner, N. H. Lindner, E. Berg y M. Levin. «Anomalous Edge States and the Bulk-Edge Correspondence for Periodically Driven Two-Dimensional Systems». En: *Physical Review X* 3.3 (jul. de 2013), pág. 031005. DOI: [10.1103/PhysRevX.3.031005](https://doi.org/10.1103/PhysRevX.3.031005). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevX.3.031005>.
- [37] T. Iadecola, T. Neupert y C. Chamon. «Topological gaps without masses in driven graphene-like systems». En: *Physical Review B* 89.11 (mar. de 2014), pág. 115425. DOI: [10.1103/PhysRevB.89.115425](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.89.115425). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.89.115425>.
- [38] Á. Gómez-León, P. Delplace y G. Platero. «Engineering anomalous quantum Hall plateaus and antichiral states with ac fields». En: *Physical Review B* 89.20 (mayo de 2014), pág. 205408. DOI: [10.1103/PhysRevB.89.205408](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.89.205408). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.89.205408>.

- [39] Y. H. Wang, H. Steinberg, P. Jarillo-Herrero y N. Gedik. «Observation of Floquet-Bloch States on the Surface of a Topological Insulator». En: *Science* 342.6157 (oct. de 2013), págs. 453-457. DOI: [10.1126/science.1239834](https://doi.org/10.1126/science.1239834). URL: <http://www.sciencemag.org/content/342/6157/453.abstract>.
- [40] M. C. Rechtsman, J. M. Zeuner, Y. Plotnik, Y. Lumer, D. Podolsky, F. Dreisow, S. Nolte, M. Segev y A. Szameit. «Photonic Floquet topological insulators». En: *Nature* 496.7444 (abr. de 2013), págs. 196-200. DOI: [10.1038/nature12066](https://doi.org/10.1038/nature12066). URL: <http://dx.doi.org/10.1038/nature12066>.
- [41] W. Zheng y H. Zhai. «Floquet topological states in shaking optical lattices». En: *Physical Review A* 89.6 (jun. de 2014), pág. 061603. DOI: [10.1103/PhysRevA.89.061603](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.89.061603). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.89.061603>.
- [42] H. L. Calvo, P. M. Perez-Piskunow, S. Roche y L. E. F. F. Torres. «Laser-induced effects on the electronic features of graphene nanoribbons Laser-induced effects on the electronic features of graphene nanoribbons». En: *Applied Physics Letters* 101.25 (2012), 253506(4). DOI: [10.1063/1.4772496](https://doi.org/10.1063/1.4772496). URL: <http://scitation.aip.org/content/aip/journal/apl/101/25/10.1063/1.4772496>.
- [43] H. L. Calvo, P. M. Perez-Piskunow, H. M. Pastawski, S. Roche y L. E. F. Foa Torres. «Non-perturbative effects of laser illumination on the electrical properties of graphene nanoribbons». En: *Journal of Physics: Condensed Matter* 25.14 (abr. de 2013), pág. 144202. DOI: [10.1088/0953-8984/25/14/144202](https://doi.org/10.1088/0953-8984/25/14/144202). URL: <http://stacks.iop.org/0953-8984/25/i=14/a=144202>.
- [44] A. M. G. Floquet. «Sur les équations différentielles linéaires à coefficients périodiques». En: *Acta Mathematica* 51.1 (1928), págs. 31-81. URL: http://www.numdam.org/item?id=ASENS%7B%5C_%7D1883%7B%5C_%7D2%7B%5C_%7D12%7B%5C_%7D%7B%5C_%7D47%7B%5C_%7D0.
- [45] J. H. Shirley. «Solution of the Schrödinger Equation with a Hamiltonian Periodic in Time». En: *Physical Review* 138.4B (mayo de 1965), B979-B987. DOI: [10.1103/PhysRev.138.B979](https://doi.org/10.1103/PhysRev.138.B979). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.138.B979>.
- [46] H. Sambe. «Steady States and Quasienergies of a Quantum-Mechanical System in an Oscillating Field». En: *Phys. Rev. A* 7.6 (jun. de 1973), págs. 2203-2213. DOI: [10.1103/PhysRevA.7.2203](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.7.2203). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.7.2203>.
- [47] D. F. Martinez. «Floquet–Green function formalism for harmonically driven Hamiltonians». En: *Journal of Physics A: Mathematical and General* 36.38 (sep. de 2003), págs. 9827-9842. DOI: [10.1088/0305-4470/36/38/302](https://doi.org/10.1088/0305-4470/36/38/302). URL: <http://stacks.iop.org/0305-4470/36/i=38/a=302?key=crossref.5fdecbc27f01a9dd0ead315929c5adbe>.

- [48] P. Delplace, Á. Gómez-León y G. Platero. «Merging of Dirac points and Floquet topological transitions in ac-driven graphene». En: *Physical Review B* 88.24 (dic. de 2013), pág. 245422. DOI: [10.1103/PhysRevB.88.245422](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.88.245422). URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.88.245422>.
- [49] D. S. L. Abergel y T. Chakraborty. «Irradiated bilayer graphene». En: *Nanotechnology* 22.1 (ene. de 2011), págs. 015203-. DOI: [10.1088/0957-4484/22/1/015203](https://doi.org/10.1088/0957-4484/22/1/015203). URL: <http://stacks.iop.org/0957-4484/22/i=1/a=015203>.
- [50] S. V. Syzranov, Y. I. Rodionov, K. I. Kugel y F. Nori. «Strongly anisotropic Dirac quasiparticles in irradiated graphene». En: *Phys. Rev. B* 88.24 (dic. de 2013), págs. 241112-. URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.88.241112>.
- [51] P. Marconcini y M. Macucci. «The k.p method and its application to graphene, carbon nanotubes and graphene nanoribbons: the Dirac equation». En: *Riv. Nuovo Cim* 34 (mayo de 2011), pág. 489. DOI: [10.1393/ncr/i2011-10068-1](https://doi.org/10.1393/ncr/i2011-10068-1). URL: <http://dx.doi.org/10.1393/ncr/i2011-10068-1>.
- [52] L. Arrachea y M. Moskalets. «Relation between scattering-matrix and Keldysh formalisms for quantum transport driven by time-periodic fields». En: *Phys. Rev. B* 74.24 (dic. de 2006), págs. 245322-. URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.74.245322>.
- [53] G. Usaj, P. M. Perez-Piskunow, L. E. F. Foa Torres y C. A. Balseiro. «Irradiated graphene as a tunable Floquet topological insulator». En: *Physical Review B* 90.11 (sep. de 2014), pág. 115423. DOI: [10.1103/PhysRevB.90.115423](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.115423). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.90.115423>.
- [54] A. Iurov y G. Gumbs. «Theory for entanglement of electrons dressed with circularly polarized light in graphene and three-dimensional topological insulators». En: ed. por E. Donkor, A. R. Pirich y H. E. Brandt. Mayo de 2013, pág. 874903. DOI: [10.1117/12.2015613](https://doi.org/10.1117/12.2015613). URL: <http://proceedings.spiedigitallibrary.org/proceeding.aspx?doi=10.1117/12.2015613>.
- [55] Y. Tenenbaum Katan y D. Podolsky. «Generation and manipulation of localized modes in Floquet topological insulators». En: *Phys. Rev. B* 88.22 (dic. de 2013), pág. 224106. DOI: [10.1103/PhysRevB.88.224106](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.88.224106). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.88.224106>.
- [56] A. Scholz, A. López y J. Schliemann. «Interplay between spin-orbit interactions and a time-dependent electromagnetic field in monolayer graphene». En: *Phys. Rev. B* 88.4 (jul. de 2013), pág. 045118. DOI: [10.1103/PhysRevB.88.045118](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.88.045118). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.88.045118>.
- [57] B. A. Bernevig, T. L. Hughes y S.-C. Zhang. «Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells». En: *Science* 314.5806 (dic. de 2006), págs. 1757-1761. DOI: [10.1126/science.1133734](https://doi.org/10.1126/science.1133734). URL: <http://www.sciencemag.org/cgi/doi/10.1126/science.1133734>.

- [58] L. Fu y C. L. Kane. «Topological insulators with inversion symmetry». En: *Phys. Rev. B* 76.4 (jul. de 2007), pág. 45302. DOI: [10.1103/PhysRevB.76.045302](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.045302). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.76.045302>.
- [59] J. E. Moore y L. Balents. «Topological invariants of time-reversal-invariant band structures». En: *Physical Review B* 75.12 (mar. de 2007), pág. 121306. DOI: [10.1103/PhysRevB.75.121306](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.75.121306). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.75.121306>.
- [60] A. Kitaev, V. Lebedev y M. Feigel'man. «Periodic table for topological insulators and superconductors». En: *AIP Conference Proceedings*. AIP, ene. de 2009, págs. 22-30. DOI: [10.1063/1.3149495](https://doi.org/10.1063/1.3149495). URL: <http://scitation.aip.org/content/aip/proceeding/aipcp/10.1063/1.3149495>.
- [61] T. Kitagawa, E. Berg, M. Rudner y E. Demler. «Topological characterization of periodically driven quantum systems». En: *Phys. Rev. B* 82.23 (dic. de 2010), pág. 235114. DOI: [10.1103/PhysRevB.82.235114](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.82.235114). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.82.235114>.
- [62] F. Nathan y M. S. Rudner. «Topological singularities and the general classification of Floquet-Bloch systems». En: (jun. de 2015). URL: <http://arxiv.org/abs/1506.07647>.
- [63] D. Carpentier, P. Delplace, M. Fruchart y K. Gawłdzki. «Topological Index for Periodically Driven Time-Reversal Invariant 2D Systems». En: *Physical Review Letters* 114.10 (mar. de 2015), pág. 106806. DOI: [10.1103/PhysRevLett.114.106806](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.114.106806). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.114.106806>.
- [64] K. Suenaga y M. Koshino. «Atom-by-atom spectroscopy at graphene edge». En: *Nature* 468.7327 (dic. de 2010), págs. 1088-1090. DOI: [10.1038/nature09664](https://doi.org/10.1038/nature09664). URL: <http://www.nature.com/doi/10.1038/nature09664>.
- [65] K. Wakabayashi, S. Okada, R. Tomita, S. Fujimoto e Y. Natsume. «Edge States and Flat Bands of Graphene Nanoribbons with Edge Modification». En: *Journal of the Physical Society of Japan* 79.3 (mar. de 2010), pág. 034706. DOI: [10.1143/JPSJ.79.034706](https://doi.org/10.1143/JPSJ.79.034706). URL: <http://journals.jps.jp/doi/abs/10.1143/JPSJ.79.034706>.
- [66] S. Kohler, J. J. Lehmann y P. Hänggi. «Driven quantum transport on the nanoscale». En: *Physics Reports* 406.6 (feb. de 2005), págs. 379-443. DOI: [10.1016/j.physrep.2004.11.002](https://doi.org/10.1016/j.physrep.2004.11.002). URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0370157304005071>.
- [67] A. Lazarides, A. Das y R. Moessner. «Periodic Thermodynamics of Isolated Quantum Systems». En: *Physical Review Letters* 112.15 (abr. de 2014), pág. 150401. DOI: [10.1103/PhysRevLett.112.150401](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.112.150401). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.112.150401>.

- [68] L. D'Alessio y M. Rigol. «Dynamical preparation of Floquet Chern insulators». En: *Nature Communications* 6 (oct. de 2015), pág. 8336. DOI: [10.1038/ncomms9336](https://doi.org/10.1038/ncomms9336). URL: <http://www.nature.com/doi/10.1038/ncomms9336>.
- [69] P. Ponte, Z. Papić, F. Huveneers y D. A. Abanin. «Many-Body Localization in Periodically Driven Systems». En: *Physical Review Letters* 114.14 (abr. de 2015), pág. 140401. DOI: [10.1103/PhysRevLett.114.140401](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.114.140401). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.114.140401>.
- [70] T. Shirai, T. Mori y S. Miyashita. «Condition for emergence of the Floquet-Gibbs state in periodically driven open systems». En: *Physical Review E* 91.3 (mar. de 2015), pág. 030101. DOI: [10.1103/PhysRevE.91.030101](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.91.030101). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.91.030101>.
- [71] T. Iadecola, T. Neupert y C. Chamon. «Occupation of topological Floquet bands in open systems». En: *Physical Review B* 91.23 (jun. de 2015), pág. 235133. DOI: [10.1103/PhysRevB.91.235133](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.235133). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.91.235133>.
- [72] K. I. Seetharam, C.-e. Bardyn, N. H. Lindner, M. S. Rudner y G. Refael. «Controlled Population of Floquet-Bloch States via Coupling to Bose and Fermi Baths». En: *arXiv:1502.02664 [cond-mat.mes-hall]* (feb. de 2015), págs. 1-24. URL: <http://arxiv.org/abs/1502.02664>.
- [73] A. Lazarides, A. Das y R. Moessner. «Equilibrium states of generic quantum systems subject to periodic driving». En: *Physical Review E* 90.1 (jul. de 2014), pág. 012110. DOI: [10.1103/PhysRevE.90.012110](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.90.012110). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.90.012110>.
- [74] a. Rivas, O. Viyuela y M. a. Martin-Delgado. «Density-matrix Chern insulators: Finite-temperature generalization of topological insulators». En: *Physical Review B* 88.15 (oct. de 2013), pág. 155141. DOI: [10.1103/PhysRevB.88.155141](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.88.155141). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.88.155141>.
- [75] H. Dehghani, T. Oka y A. Mitra. «Dissipative Floquet topological systems». En: *Physical Review B* 90.19 (nov. de 2014), pág. 195429. DOI: [10.1103/PhysRevB.90.195429](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.195429). URL: <http://arxiv.org/abs/1406.6626> <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.90.195429>.
- [76] M. Fruchart, P. Delplace, J. Weston, X. Waintal y D. Carpentier. «Probing (topological) Floquet states through DC transport». En: *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* 75 (ene. de 2016), págs. 287-294. DOI: [10.1016/j.physe.2015.09.035](https://doi.org/10.1016/j.physe.2015.09.035). URL: <http://dx.doi.org/10.1016/j.physe.2015.09.035>.
- [77] T. Bilitewski y N. R. Cooper. «Scattering theory for Floquet-Bloch states». En: *Physical Review A* 91.3 (mar. de 2015), pág. 033601. DOI: [10.1103/PhysRevA.91.033601](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.91.033601). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.91.033601>.

- [78] A. Farrell y T. Pereg-Barnea. «Edge State Transport in Floquet Topological Insulators». En: 8 (mayo de 2015), págs. 3-7. URL: <http://arxiv.org/abs/1505.05584>.
- [79] I. C. Fulga y M. Maksymenko. «Scattering theory of Floquet topological insulators». En: (ago. de 2015). URL: <http://arxiv.org/abs/1508.02726>.
- [80] L. E. F. Foa Torres, P. M. Perez-Piskunow, C. A. Balseiro y G. Usaj. «Multiterminal Conductance of a Floquet Topological Insulator». En: *Physical Review Letters* 113.26 (dic. de 2014), pág. 266801. DOI: [10.1103/PhysRevLett.113.266801](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.113.266801). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.113.266801>.
- [81] M. Moskalets y M. Büttiker. «Floquet scattering theory of quantum pumps». En: *Phys. Rev. B* 66.20 (nov. de 2002), págs. 205320-. DOI: [10.1103/PhysRevB.66.205320](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.205320). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.66.205320>.
- [82] S. Camalet, J. Lehmann, S. Kohler y P. Hänggi. «Current Noise in ac-Driven Nanoscale Conductors». En: *Phys. Rev. Lett.* 90.21 (mayo de 2003), págs. 210602-. URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.90.210602>.
- [83] C. W. Groth, M. Wimmer, A. R. Akhmerov y X. Waintal. «Kwant: a software package for quantum transport». En: *New Journal of Physics* 16.6 (jun. de 2014), pág. 063065. DOI: [10.1088/1367-2630/16/6/063065](https://doi.org/10.1088/1367-2630/16/6/063065). URL: <http://stacks.iop.org/1367-2630/16/i=6/a=063065>.
- [84] A. Gómez-León y G. Platero. «Floquet-Bloch Theory and Topology in Periodically Driven Lattices». En: *Physical Review Letters* 110.20 (mayo de 2013), pág. 200403. DOI: [10.1103/PhysRevLett.110.200403](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.110.200403). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.110.200403>.
- [85] H. Dehghani, T. Oka y A. Mitra. «Out-of-equilibrium electrons and the Hall conductance of a Floquet topological insulator». En: *Physical Review B* 91.15 (abr. de 2015), pág. 155422. DOI: [10.1103/PhysRevB.91.155422](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.155422). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.91.155422>.
- [86] A. Kundu, H. A. Fertig y B. Seradjeh. «Effective Theory of Floquet Topological Transitions». En: *Physical Review Letters* 113.23 (dic. de 2014), pág. 236803. DOI: [10.1103/PhysRevLett.113.236803](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.113.236803). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.113.236803>.
- [87] M. Fruchart. «Complex classes of periodically driven topological lattice systems». En: 1.1 (2015), págs. 1-9. URL: <http://arxiv.org/abs/1511.06755>.
- [88] P. M. Perez-Piskunow, L. E. F. Foa Torres y G. Usaj. «Hierarchy of Floquet gaps and edge states for driven honeycomb lattices». En: *Physical Review A* 91.4 (abr. de 2015), pág. 043625. DOI: [10.1103/PhysRevA.91.043625](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.91.043625). URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.91.043625>.

- [89] T. Mikami, S. Kitamura, K. Yasuda, N. Tsuji, T. Oka y H. Aoki. «Brillouin-Wigner theory for high-frequency expansion in periodically driven systems: Application to Floquet topological insulators». En: 2 (2015), págs. 1-26. URL: <http://arxiv.org/abs/1511.00755>.
- [90] L. Privitera y G. E. Santoro. «Quantum annealing and non-equilibrium dynamics of Floquet Chern insulators». En: (2015), págs. 1-7. URL: <http://arxiv.org/abs/1508.01883>.
- [91] G. Jotzu, M. Messer, R. Desbuquois, M. Lebrat, T. Uehlinger, D. Greif y T. Esslinger. «Experimental realization of the topological Haldane model with ultracold fermions». En: *Nature* 515.7526 (nov. de 2014), págs. 237-240. DOI: 10.1038/nature13915. URL: <http://www.nature.com/doi/10.1038/nature13915>.
- [92] H. L. Calvo, L. E. F. Foa Torres, P. M. Perez-Piskunow, C. A. Balseiro y G. Usaj. «Floquet interface states in illuminated three-dimensional topological insulators». En: *Physical Review B* 91.24 (jun. de 2015), 241404(R). DOI: 10.1103/PhysRevB.91.241404. URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.91.241404>.

APÉNDICE A

MODELOS PARA DESCRIBIR EL GRAFENO IRRADIADO

Contenidos

A.1. Modelo tight-binding para grafeno bulk irradiado	93
A.2. Modelo $k \cdot p$ para GNR's irradiadas	95
A.2.1. Nanocintas de grafeno armchair	96
A.2.2. Nanocintas de grafeno zigzag	100

A.1. Modelo tight-binding para grafeno bulk irradiado

Para describir el grafeno irradiado utilizamos un modelo de red, con orbitales π y acoples a primeros vecinos que forman una red hexagonal.

El Hamiltoniano de red

$$\mathcal{H}_{\text{tb}} = \sum_i \varepsilon_i \hat{c}_i \hat{c}_i^\dagger - \sum_{\langle i,j \rangle} t_{i,j} \hat{c}_i \hat{c}_j^\dagger + \text{H.c.}, \quad (\text{A.1})$$

donde la sumatoria corre sobre los primeros vecinos, $t_{i,j}$ es la amplitud de hopping entre los sitios ubicados en \mathbf{r}_i y \mathbf{r}_j , y dado que son primeros vecinos, cada sitio pertenece a una subred distinta. Los sitios de tipo B están desplazados de los sitios de tipo A en las direcciones

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_1 &= a_0(1, 0) \\ \mathbf{d}_2 &= a_0\left(\frac{-1}{2}, \frac{-\sqrt{3}}{2}\right) \\ \mathbf{d}_3 &= a_0\left(\frac{-1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right) \end{aligned}$$

Si los hoppings en cada dirección son homogéneos, t_j , $j = 1, 2, 3$, podemos utilizar el teorema de Bloch y reducir el Hamiltoniano de la Ec. (A.1) al Hamiltoniano de

Bloch

$$\mathcal{H}_{\text{TB}}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \varepsilon_A & S(\mathbf{k}) \\ S(\mathbf{k})^* & \varepsilon_B \end{pmatrix}, \quad (\text{A.2})$$

donde $S(\mathbf{k}) = \sum_{j=1}^3 t_j e^{i\mathbf{d}_j \cdot \mathbf{k}}$ y $S(\mathbf{k})^*$ su complejo conjugado.

Podemos describir la radiación electromagnética mediante el potencial vector $\mathbf{A}(\tau)$. El efecto del potencial electromagnético es modular la fase de los hoppings t_j a través de la sustitución de Peierls

$$t_j \longrightarrow t_j(\tau) = t \exp\left(i \frac{2\pi}{\Phi_0} \mathbf{A}(\tau) \cdot \mathbf{d}_j\right),$$

donde Φ_0 es el cuanto de flujo magnético, donde hemos evaluado la integral ya que el potencial vector es homogéneo en el plano (x, y) . De esta forma obtenemos un Hamiltoniano de Bloch dependiente periódicamente del tiempo.

$$\mathcal{H}_{\text{TB}}(\mathbf{k}, \tau) = \begin{pmatrix} 0 & S(\mathbf{k}, \tau) \\ S(\mathbf{k}, \tau)^* & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.3})$$

$$S(\mathbf{k}, \tau) = \sum_i t e^{i\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{k}} \times \exp\left(i \frac{2\pi}{\Phi_0} \mathbf{A}(\tau) \cdot \mathbf{d}_i\right)$$

Para obtener la componente $\mathcal{H}_F^{m,n}$ del Hamiltoniano de Floquet-Bloch, debemos calcular la componente (H^{m-n}) de Fourier del Hamiltoniano de Bloch dependiente del tiempo. Esto implica obtener la componente $(m-n)$ del hopping $t_j(\tau)$. Esta integral depende explícitamente del potencial vector $\mathbf{A}(\tau)$, que para radiación coherente puede escribirse como $\mathbf{A}(\tau) = \hat{\mathbf{x}} A_x \sin(\Omega\tau) + \hat{\mathbf{y}} A_y \sin(\Omega\tau + \phi_0)$, donde ϕ_0 es una fase relativa entre las componentes, con $\phi_0 = 0$ para polarización lineal y $\phi = \pm\pi/2$ para polarización circular. La componente de Fourier de $t_j(\tau)$ es

$$t_j^n(\tau) = \sum_n t_j^n e^{-in\Omega\tau}$$

$$t_j^n = \frac{1}{T} \int_0^T t e^{in\Omega\tau} \times \exp\left(i \frac{2\pi}{\Phi_0} \mathbf{A}(\tau) \cdot \mathbf{d}_j\right) d\tau$$

$$= \frac{1}{T} \int_0^T t e^{in\Omega\tau} \times e^{iz_x^j \sin(\Omega\tau)} e^{iz_y^j \sin(\Omega\tau + \phi_0)} d\tau \quad (\text{A.4})$$

$$= \frac{1}{T} \int_0^T t e^{in\Omega\tau} \times e^{i(z_x^j + z_y^j \cos(\phi_0)) \sin(\Omega\tau)} e^{iz_y^j \sin(\phi_0) \cos(\Omega\tau)} d\tau$$

donde $z_x^j = \frac{2\pi}{\Phi_0} A_x \hat{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{d}_j$ y $z_y^j = \frac{2\pi}{\Phi_0} A_y \hat{\mathbf{y}} \cdot \mathbf{d}_j$. Para resolver esta integral hacemos uso de las expansiones de Anger-Jacobi

$$e^{iz \cos(\theta)} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} i^n J_n(z) e^{in\theta}$$

$$e^{iz \sin(\theta)} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(z) e^{in\theta}.$$

Insertando esta expansión obtenemos

$$\begin{aligned}
t_j^n &= \frac{1}{T} \int_0^T t e^{in\Omega\tau} \times \left(\sum_m J_m(z_x^j + z_y^j \cos(\phi_0)) e^{im\Omega\tau} \right) \times \\
&\quad \left(\sum_{m'} i^{m'} J_{m'}(z_y^j \sin(\phi_0)) e^{im'\Omega\tau} \right) d\tau \\
&= \sum_{m,m'} \frac{1}{T} \int_0^T t e^{i(n-(m+m'))\Omega\tau} i^{m'} J_{m'}(z_y^j \sin(\phi_0)) J_m(z_x^j + z_y^j \cos(\phi_0)) d\tau \\
&= t \sum_{m,m'} \delta_{m+m',n} i^{m'} J_{m'}(z_y^j \sin(\phi_0)) J_m(z_x^j + z_y^j \cos(\phi_0)) \\
&= t \sum_{m'} i^{m'} J_{m'}(z_y^j \sin(\phi_0)) J_{n-m'}(z_x^j + z_y^j \cos(\phi_0))
\end{aligned}$$

Con esta última expresión ya podemos calcular los coeficientes de la matriz de Floquet, aunque los cálculos son más simples si utilizamos la identidad [48]

$$e^{in\varphi} J_n(z) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} J_{n+m}(\alpha) J_m(\beta) e^{-im\Omega},$$

donde $z = \sqrt{\alpha^2 + \beta^2 - 2\alpha\beta \cos(\phi)}$, y $\varphi = \tan^{-1}(\beta \sin(\Omega)/(\alpha - \beta \cos(\Omega)))$. En este caso es evidente que los acoples entre sitios que pertenecen a distintas réplicas es proporcional a la función de Bessel del orden de la diferencia entre las réplicas $t_j^{n-m} \propto J_{n-m}(z)$.

A.2. Modelo $k \cdot p$ para GNR's irradiadas

En esta Sección deducimos cómo son los acoples inducidos por el campo electromagnético entre los distintos modos transversales de una nanocinta de grafeno armchair y zigzag. Para obtener los modos transversales de las nanocintas seguimos las deducciones de la Ref. [51].

El Hamiltoniano $k \cdot p$ que describe el sistema a bajas energías cerca de los valles K_{\pm} es

$$\mathcal{H}_{kp} = \hbar v_F (\sigma_x \hat{x} + \nu \sigma_y \hat{y}) \cdot \hat{k},$$

donde utilizamos la notación \hat{k} para distinguir el operador momento de su autovalor, $\nu = \mp 1$ es el índice de valle para K_{\pm} , y las matrices de Pauli

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} -i & \\ i & 0 \end{pmatrix}.$$

Para ambos valles en conjunto el Hamiltoniano $k \cdot p$ toma la forma

$$\mathcal{H}_{kp} = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & \hat{k}_- & 0 & 0 \\ \hat{k}_+ & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \hat{k}_+ \\ 0 & 0 & \hat{k}_- & 0 \end{pmatrix},$$

done $\hat{k}_\pm = \hat{k}_x \pm i \hat{k}_y$.

Bajo la incidencia perpendicular de radiación, el campo electromagnético es homogéneo en el plano del grafeno y para describirlo utilizamos el potencial vector $\mathbf{A}(t) = \text{Re}(\mathbf{A}_0 e^{i\Omega t})$, con Ω la frecuencia de la radiación, y el vector $\mathbf{A}_0 = A_x \hat{x} + A_y \hat{y}$. La magnitud de las componentes A_x y A_y define la dirección de la polarización. Si estas componentes son reales la polarización es lineal en la dirección de \mathbf{A}_0 , mientras que si existe una fase relativa entre ellas la radiación es elíptica o circular cuando la fase relativa es $\pm\pi/2$.

Para describir el Hamiltoniano dependiente del tiempo utilizamos la sustitución canónica $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}(t)$ y obtenemos

$$\mathcal{H}_{kp}(t) = \hbar v_F (\sigma_x \hat{x} + \nu \sigma_y \hat{y}) \cdot [\mathbf{k} + \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}(t)],$$

Con este la dependencia temporal explícita podemos armar el Hamiltoniano de Floquet truncado a las réplicas 0 y 1

$$\mathcal{H}_F = \begin{pmatrix} H^0 & V^1 \\ V^{-1} & H^0 + \hbar\Omega \end{pmatrix},$$

donde

$$\mathbf{V}^m = e v_F \begin{pmatrix} 0 & A_-^m & 0 & 0 \\ A_+^m & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A_+^m \\ 0 & 0 & A_-^m & 0 \end{pmatrix},$$

donde A_\pm^m es la componente de Fourier de orden m de $A_\pm(t) = (A_x \pm i A_y) e^{i\Omega t}$.

Los modos que pertenecen a cada réplica están definidos por H^0 , y se acoplan entre ellos a través de $V^{\pm 1}$. Deducimos a continuación cómo son los modos transversales para una cinta armchair.

A.2.1. Nanocintas de grafeno armchair

Las funciones de onda expandidas a bajas energías pueden ser descritas por

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}_A} \psi_A(\mathbf{R}_A) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A) + \sum_{\mathbf{R}_B} \psi_B(\mathbf{R}_B) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_B),$$

donde

$$\begin{cases} \psi_A(\mathbf{r}) &= e^{i\mathbf{K}_- \cdot \mathbf{r}} F_A^{K_-}(\mathbf{r}) - i e^{i\mathbf{K}_+ \cdot \mathbf{r}} F_A^{K_+}(\mathbf{r}) \\ \psi_B(\mathbf{r}) &= i e^{i\mathbf{K}_- \cdot \mathbf{r}} F_B^{K_-}(\mathbf{r}) + e^{i\mathbf{K}_+ \cdot \mathbf{r}} F_B^{K_+}(\mathbf{r}), \end{cases}$$

son las funciones envolventes que describen la amplitud y fase de la función de onda sobre los sitios A y B .

Definimos los puntos K_{\pm} con puntos equivalentes a la definición de los capítulos 2 y 3. Para simplificar los cálculos elegimos los puntos K_{\pm} sobre el eje k_y , siendo $\mathbf{K}_- = -K\hat{y}$ y $\mathbf{K}_+ = K\hat{y}$, con $K = \frac{4\pi}{3a}$. El vector que representa la función de onda es

$$\left(F_A^{K_-}(\mathbf{r}) \quad F_B^{K_-}(\mathbf{r}) \quad F_A^{K_+}(\mathbf{r}) \quad F_B^{K_+}(\mathbf{r}) \right)^T,$$

expandidas alrededor de los puntos \mathbf{K}_- y \mathbf{K}_+ de la primera zona de Brillouin para los sitios de tipo A y B .

Vamos a tratar el caso de nanocintas, donde una de las direcciones está confinada, por lo tanto queremos las funciones envolventes definidas en función de la posición, y deben satisfacer la ecuación diferencial definida por el Hamiltoniano, junto a las condiciones de borde apropiadas. Dado que cambiamos entre la base de momentos y de posiciones es útil recordar que \hat{k} es el operador momento tal que $\hat{k} \equiv -i\nabla$.

Dado que el sistema tiene invarianza traslacional a lo largo del eje x podemos separar la componente longitudinal de la componente transversal debido al confinamiento en y , para cada valle

$$\begin{aligned} F_A^{K_-}(\mathbf{r}) &= e^{ik_x x} \Phi_A^{K_-}(y) \\ F_B^{K_-}(\mathbf{r}) &= e^{ik_x x} \Phi_B^{K_-}(y) \\ F_A^{K_+}(\mathbf{r}) &= e^{ik'_x x} \Phi_A^{K_+}(y) \\ F_B^{K_+}(\mathbf{r}) &= e^{ik'_x x} \Phi_B^{K_+}(y), \end{aligned} \tag{A.5}$$

donde mantenemos k_x y k'_x distinguiendo cada valle por el momento, y las funciones $\Phi_{A(B)}^{K_{\pm}}(y)$ definen los modos transversales.

Condiciones de borde de una nanocinta armchair

Utilizamos las condiciones de borde de masa infinita, de manera que la función de onda se anula en sitios virtuales adyacentes a los bordes de la muestra, localizados en los puntos $y = 0, \tilde{W}$, con $\tilde{W} = a \frac{N+1}{2}$. Luego exigimos que las funciones de onda

satisfagan

$$\begin{aligned} \psi(x, y = 0) = 0 &\Rightarrow \begin{cases} \psi_A(x, y = 0) = 0 \\ \psi_B(x, y = 0) = 0 \end{cases} \\ \psi(x, y = \tilde{W}) = 0 &\Rightarrow \begin{cases} \psi_A(x, y = \tilde{W}) = 0 \\ \psi_B(x, y = \tilde{W}) = 0, \end{cases} \end{aligned}$$

o equivalentemente

$$\begin{aligned} 0 &= \Phi_A^{K-}(0) - i\Phi_A^{K+}(0) \\ 0 &= i\Phi_B^{K-}(0) + \Phi_B^{K+}(0) \\ 0 &= e^{-iK\tilde{W}}\Phi_A^{K-}(\tilde{W}) - ie^{iK\tilde{W}}\Phi_A^{K+}(\tilde{W}) \\ 0 &= ie^{-iK\tilde{W}}\Phi_B^{K-}(\tilde{W}) + e^{iK\tilde{W}}\Phi_B^{K+}(\tilde{W}), \end{aligned} \tag{A.6}$$

Como podemos ver de la Ec. (A.6), las condiciones de borde armchair no acoplan las funciones envolventes de sitios de distinto tipo, pero sí acopla las funciones envolventes dentro de la misma familia de sitios A y B que pertenecen a diferentes valles K_- y K_+ .

Las condiciones de borde implican que la componente transversal de las soluciones para $Phi_A^{K_{\pm}}$ y $Phi_B^{K_{\pm}}$ están indexadas por un k_n y son discretas, mientras que la componente paralela al borde debe ser idéntica para los valles K_- y K_+ , por lo que $k_x = k'_x$ en la Ec.(A.5).

Las soluciones toman la forma

$$\begin{pmatrix} F_A^{K-} \\ F_B^{K-} \\ F_A^{K+} \\ F_B^{K+} \end{pmatrix} (x, y) = C e^{ik_x x} \begin{pmatrix} s e^{i\alpha} e^{-ik_n y} \\ e^{-ik_n y} \\ -i s e^{i\alpha} e^{ik_n y} \\ -i e^{ik_n y} \end{pmatrix},$$

donde $s = \pm 1$ es el índice de banda, $C = \frac{1}{\sqrt{4\tilde{W}}}$ una constante de normalización,

$$\begin{aligned} e^{i\alpha} &= \frac{(k_x + ik_n)}{\sqrt{k_x^2 + k_n^2}} & \alpha &= \tan^{-1} k_n/k_x \\ k_n &= \frac{n\pi}{\tilde{W}} - K & \tilde{W} &= a \frac{N+1}{2}, \end{aligned}$$

siendo N el número de filas de sitios a lo largo del ancho de la cinta.

Dado que la energía es $\varepsilon = \sqrt{k_x^2 + k_n^2}$, podemos ver que el sistema será metálico si existe uno o más modos que se aproximen continuamente a $\varepsilon = 0$. Esto sucede solo cuando existen una solución con $k_n = 0$ De la expresión anterior encontramos que

$$k_n = \frac{n\pi}{\tilde{W}} - K \quad K = \frac{4\pi}{3a} \quad \tilde{W} = a \frac{N+1}{2} \quad \Rightarrow k_n = 2\pi \frac{3n - 2(N+1)}{3(N+1)}.$$

Entonces, las cintas aGNR son metálicas sólo cuando $2(N + 1) = 3M$, para algún M entero, que equivale a $N \pmod{3} = 2$.

Transiciones inducidas por la radiación

Los modos transversales son ortogonales entre ellos, pero el potencial vector puede mezclarlos. Para ver esto analizamos el vector resultante de aplicar la matriz V^m a un modo $|\psi\rangle = |k_x, n, s\rangle$

$$\begin{aligned} \langle y | \mathbf{V}^m | \psi \rangle &= C \begin{pmatrix} 0 & A_-^m & 0 & 0 \\ A_+^m & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A_+^m \\ 0 & 0 & A_-^m & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s e^{i\alpha} e^{-ik_n y} \\ e^{-ik_n y} \\ -i s e^{i\alpha} e^{ik_n y} \\ -i e^{ik_n y} \end{pmatrix} \\ &= C \begin{pmatrix} A_-^m e^{-ik_n y} \\ A_+^m s e^{i\alpha} e^{-ik_n y} \\ A_+^m (-i e^{ik_n y}) \\ A_-^m (-i s e^{i\alpha} e^{ik_n y}) \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

donde k_x es el vector de onda paralelo al borde, n el índice del modo transversal y s representa la banda de valencia $s = -1$ o de conducción $s = 1$. Vemos el caso $m = 1$ y descartamos el índice para simplificar la notación.

El elemento de matriz entre dos modos $|\psi\rangle = |k_x, n, s\rangle$ pertenecientes a la réplica 0, y $|\psi'\rangle = |k_x, n', s'\rangle$ perteneciente a la réplica 1 definen la amplitud de acople entre los modos. Para que se crucen estos modos en $\varepsilon = \hbar\Omega/2$ debemos pedir $s = 1$, $s' = -1$, pero mantenemos los índices para obtener una expresión general.

$$\begin{aligned} \frac{\langle \psi' | \mathbf{V} | \psi \rangle}{e v_F C^2} &= \int_0^{\tilde{W}} \left[s' e^{-i\alpha'} e^{ik_{n'} y} A_- e^{-ik_n y} + e^{ik_{n'} y} A_+ s e^{i\alpha} e^{-ik_n y} \right] dy \\ &+ \int_0^{\tilde{W}} \left[s' e^{-i\alpha'} e^{-ik_{n'} y} A_+ e^{ik_n y} + e^{-ik_{n'} y} A_- s e^{i\alpha} e^{ik_n y} \right] dy \\ &= s' e^{-i\alpha'} \int_0^{\tilde{W}} \left[A_+ e^{i(k_n - k_{n'}) y} + A_- e^{-i(k_n - k_{n'}) y} \right] dy \\ &+ s e^{i\alpha} \int_0^{\tilde{W}} \left[A_+ e^{-i(k_n - k_{n'}) y} + A_- e^{i(k_n - k_{n'}) y} \right] dy \\ &= \int_0^{\tilde{W}} \left(2s' e^{-i\alpha'} \left[A_x \cos((k_n - k_{n'}) y) - A_y \sin((k_n - k_{n'}) y) \right] \right. \\ &\left. + 2s e^{i\alpha} \left[A_x \cos((k_n - k_{n'}) y) + A_y \sin((k_n - k_{n'}) y) \right] \right) dy \end{aligned}$$

Ahora podemos distinguir dos casos: el acople entre los mismos modos $n = n'$ o entre distintos modos $n \neq n'$. Además, el acople entre modos distintos decae como $1/(n - n')$, por lo que los modos más cercanos a n serán los que se vean afectados

por un acople mayor. Los elementos de matriz son

$$\langle \psi' | \mathbf{V} | \psi \rangle = \begin{cases} \text{si } n \neq n' \Rightarrow & ev_F C^2 \left(A_x (s e^{i\alpha} + s' e^{-i\alpha'}) 2 \frac{\sin((n-n')\pi)}{(n-n')\pi/W} \right. \\ & \left. + A_y (s e^{i\alpha} - s' e^{-i\alpha'}) 2 \frac{1 - \cos((n-n')\pi)}{(n-n')\pi/W} \right) \\ \text{si } n = n' \Rightarrow & ev_F C^2 A_x (s e^{i\alpha} + s' e^{-i\alpha'}) 2W \end{cases}$$

En una forma más compacta vemos que

$$\langle \psi' | \mathbf{V} | \psi \rangle = \begin{cases} \text{if } n \neq n' \Rightarrow & ev_F \frac{A_y}{2} (s e^{i\alpha} - s' e^{-i\alpha'}) \frac{1 - (-1)^{n-n'}}{(n-n')\pi} \\ \text{if } n = n' \Rightarrow & ev_F \frac{A_x}{2} (s e^{i\alpha} + s' e^{-i\alpha'}) \end{cases}$$

donde podemos ver que sólo la componente A_x genera transiciones *intra-modo*, es decir entre los mismos modos $n = n'$, y que sólo la componente A_y genera transiciones *inter-modo*, entre modos distintos $n \neq n'$.

Si observamos el cruce de bandas en $\varepsilon = \hbar\Omega/2$, entonces $s = 1$ y $s' = -1$, y podemos ver que para las transiciones *intra-modo* $n = n' \Rightarrow \alpha = \alpha'$, por lo tanto

$$\begin{aligned} \langle \psi' | \mathbf{V} | \psi \rangle &= ev_F \frac{A_x}{2} (e^{i\alpha} - e^{-i\alpha}) \\ &= ev_F \frac{A_x}{2} 2i \sin(\alpha) \\ &= ev_F \frac{A_x}{2} 2i \frac{k_n}{\sqrt{k_x^2 + k_n^2}} \end{aligned}$$

por lo que el acople depende de la componente transversal y se anula cuando $k_n = 0$, es decir que el modo metálico no se acopla a la radiación de polarización lineal en la dirección paralela al borde armchair.

A.2.2. Nanocintas de grafeno zigzag

En el caso de las cintas zigzag el borde es perpendicular a la dirección de las cintas armchair. Para mantener la coordenada x en la dirección de la cinta rotamos los ejes tal que ahora $\mathbf{K}_{\pm} = \pm K \hat{x}$. Entonces, la función de onda es

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}_A} \psi_A(\mathbf{R}_A) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A) + \sum_{\mathbf{R}_B} \psi_B(\mathbf{R}_B) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_B)$$

donde

$$\begin{cases} \psi_A(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} F_A^K(\mathbf{r}) + e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} F_A^{K+}(\mathbf{r}) \\ \psi_B(\mathbf{r}) = -e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} F_B^K(\mathbf{r}) + e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} F_B^{K+}(\mathbf{r}) \end{cases}$$

Las condiciones de borde de masa infinita exigen que la función de onda se anule en sitios virtuales adyacentes al borde de la cinta, de modo que una cinta zigzag terminada en sitios de tipo A debe anularse en los sitios adyacentes, todos

pertenecientes a la familia de sitios B . Los sitios virtuales se conforman por una fila de sitios B en $y = 0$, y una fila de sitios A $y = \tilde{W} = a \frac{3N+2}{2}$. Luego, las funciones envolventes deben satisfacer

$$\begin{aligned} \psi_B(x, y = 0) = 0 &\Rightarrow \begin{cases} \Phi_B^K(0) = 0 \\ \Phi_B^{K^+}(0) = 0 \end{cases} \\ \psi_A(x, y = \tilde{W}) = 0 &\Rightarrow \begin{cases} \Phi_B^K(0) = 0 \\ \Phi_B^{K^+}(0) = 0 \end{cases} \end{aligned}$$

Estas condiciones de borde no acopla las funciones envolventes expandidas alrededor de los valles K_{\pm} , aunque las funciones envolventes para los sitios A y B están acopladas por el Hamiltoniano.

La solución general para cada valle K_{\pm} toma la forma

$$\begin{aligned} \Phi_A^{K_{\pm}}(y) &= \mp s C \sinh(z(y - \tilde{W})) \\ \Phi_B^{K_{\pm}}(y) &= C \sinh(z y), \end{aligned}$$

donde s es el índice de banda, y z es solución de la ecuación trascendental $z = k_x \tanh(z\tilde{W})$, indexadas por z_n . Esta componente transversal puede tener valores reales como imaginarios. Cuando toma un valor real representa un modo localizado en los sitios B cerca del borde $y = 0$, y un modo localizado en sitios A cerca del borde $y = \tilde{W}$. En esta sección nos centraremos en las soluciones con $z_n = i k_n$, que son los modos extendidos que se acoplan en $\varepsilon = \hbar\Omega/2$.

Los modos extendidos cumplen con

$$\begin{aligned} \Phi_A^{K_{\pm}}(y) &= \mp C s \sin(k_n(y - \tilde{W})) \\ \Phi_B^{K_{\pm}}(y) &= C \sin(k_n y). \end{aligned}$$

Transiciones inducidas por la radiación

La amplitud de acople entre distintos modos del valle K_- está dado por el elemento de matriz entre $|\psi\rangle = |k_x, n, s\rangle$ pertenecientes a la réplica 0, y $|\psi'\rangle = |k_x, n', s'\rangle$ perteneciente a la réplica 1. Siguiendo los pasos que tomamos para las cintas armchair podemos ver que

$$\langle \psi' | \mathbf{V} | \psi \rangle = \frac{C_n C_{n'}}{k_n^2 - k_{n'}^2} (A_+ s + i A_- s') \times (k_{n'} \sin(k_n \tilde{W}) - k_n \sin(k_{n'} \tilde{W}))$$

con constantes de normalización $C_n = 1/\sqrt{\tilde{W} - \frac{\sin(2k_n \tilde{W})}{2k_n}}$. Las transiciones permitidas en las cintas zigzag son menos obvias de analizar, pero podemos ver que las transiciones decaen con $1/(k_n^2 - k_{n'}^2)$, lo que significa que los modos más cercanos serán los de mayor acople para cualquier polarización, es decir, sin asumir $A_x = 0$ o

$A_y = 0$. Tomando el límite para transiciones entre los mismos modos $n = n'$

$$\langle \psi' | \mathbf{V} | \psi \rangle = C_n C_{n'} e v_F (i A_y) \times \left(\tilde{W} \cos(k_n \tilde{W}) - \frac{\sin(k_n \tilde{W})}{k_n} \right),$$

donde vemos que la amplitud de acople para las transiciones *intra-modo* sólo depende de la componente A_y de la radiación.

La polarización perpendicular al borde produce las transiciones *intra-modo* para las cintas zigzag, mientras que el comportamiento opuesto ocurre para las cintas armchair, donde sólo la polarización paralela al borde produce estas transiciones.