

Seguro no recordan la extensi n del 1D a 2D

①

Sea  $\mathcal{Y} = \begin{pmatrix} -2t \cos k_x - 2t \sin k_y - \mu & \Delta(\sin k_x - i \sin k_y) \\ \Delta(\sin k_x + i \sin k_y) & 2t(\sin k_x + \cos k_y) + \mu \end{pmatrix}$

que tiene que ver con el grafito?

Nada... y tools, mejor sigamos solamente.

$$\mathcal{Y} = \mathcal{Y}_x \mathbb{G}_x + \mathcal{Y}_y \mathbb{G}_y + \mathcal{Y}_z \mathbb{G}_z$$

$$\mathcal{Y}_x = \Delta \sin(k_x)$$

$$\mathcal{Y}_y = \Delta \sin(k_y)$$

$$\mathcal{Y}_z = -2t \cos k_x - 2t \cos k_y - \mu$$

} esto es como el grafito:

buscamos cosas generales, tan generales que solo dependen del algoritmo empleado y no de detalles

$$\text{diagonalizmos } \mathcal{H} = \vec{\mathcal{H}} \cdot \vec{\mathbf{I}} \Rightarrow \mathcal{H}^2 = |\vec{\mathcal{H}}|^2$$

②

$$\Rightarrow E_{\pm} = \sqrt{\mathcal{H}_x^2 + \mathcal{H}_y^2 + \mathcal{H}_z^2}$$

hay gap? Si obidamos  $\mathcal{H}_z$  la respuesta es No  
(porque?)

Pínselo ...

(Si ya pensó siga leyendo)

Simetría quiral con el mismo hopping  $\Rightarrow$  metálico

(recuerden la ecuación de Dirac con  $m(x) = \begin{cases} -m, & x < 0 \\ +m, & x > 0 \end{cases} ?$ )

es decir si no existe  $\mathcal{H}_z$  debe existir un punto (al menos)

$$\text{con } \mathcal{H}_x = \mathcal{H}_y(k) = 0$$

(3)

los valores propios de  $\gamma = \vec{\gamma} \cdot \vec{J}$  son (wikipedia)

$$U_+ = \frac{1}{N} \begin{pmatrix} i\gamma_3 + |\vec{\gamma}| \\ \gamma_{1z} + i\gamma_{2z} \end{pmatrix}, U_- = \frac{1}{N} \begin{pmatrix} i\gamma_2 - i\gamma_{1z} \\ \gamma_{3z} + |\vec{\gamma}| \end{pmatrix}$$

quedemos con  $U_-$ :

el punto  $k_x = k_y = 0$  es especial así:

$$\gamma_{1x}(0,0) = \Delta m(0) = 0$$

$$\gamma_{1y}(0,0) = \Delta m(0) = 0$$

$$\gamma_{1z}(0,0) = -2t \cos(\theta) - 2t \cos(0) - \mu = -4t - \mu < 0 \quad (\text{dijeron que } t, \mu > 0)$$

$$\therefore U_-(0,0) = \begin{pmatrix} 0 \\ \gamma_{2z} + |\vec{\gamma}| \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \gamma_{2z} + |\vec{\gamma}_z| \end{pmatrix}$$

$$\text{como } \gamma_{2z} < 0 \Rightarrow U(0,0) = \begin{pmatrix} 0 \\ |\vec{\gamma}_z - \vec{\gamma}_{2z}| \end{pmatrix} = 0!$$

(4)

se nos cerrumbre la mecánica cuántica!

pero nos acordamos ~~del campo~~ de las clases de la simetría de gauge U(1)

Podemos realizar:

$$U(\vec{k}) = U_0(\vec{k}) e^{i\phi(\vec{k})}$$

$$\vec{A}_-(\vec{k}) = \vec{A}_0(\vec{k}) + \nabla_{\vec{k}}\phi(\vec{k}) \rightarrow \text{potencial vector de Berry}$$


---

Porque esto nos arreglaría la situación de  $U(0)=0$ ?

Hint: recuerde los monopos magnéticos

... es imposible tener un potencial vector que no sea singular en alguno parte de una superficie cerrada (si hay un monopolo).

Solución tener 2 potenciales vector.

(5)

Recuerden que la analogía es completa, la superficie de  $\vec{k}$  es curvada y  $\vec{A}$  de Berry transforme como un potencial vector.

Hágámoslo:

$$u_{-}(k) = \frac{1}{N} \begin{pmatrix} i\gamma_y - \gamma_x \\ \gamma_z + |\vec{\gamma}| \end{pmatrix} \quad (\text{la parte de arriba invierte a multiplicar por } (i\gamma_y - \gamma_x)^*)$$

y la de abajo  $(\gamma_z + |\vec{\gamma}|)$ )

$$\text{as } u'_-(k) = \frac{1}{N} \begin{pmatrix} (i\gamma_y - \gamma_x)(-\bar{i}\gamma_y - \bar{\gamma}_x) \\ (\gamma_z + |\vec{\gamma}|)(-\bar{i}\gamma_y - \bar{\gamma}_x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{\gamma}_x^2 + \gamma_y^2 \\ (\gamma_z + \bar{\gamma}_z) \end{pmatrix} \frac{1}{N} = \frac{1}{N} \begin{pmatrix} |\vec{\gamma}|^2 - \bar{\gamma}_z^2 \\ |\vec{\gamma}| + \bar{\gamma}_z \end{pmatrix} = \frac{-1}{N} \begin{pmatrix} \bar{\gamma}_z - |\vec{\gamma}| \\ \gamma_z + i\bar{\gamma}_y \end{pmatrix}$$

Ahora que tenemos nuestro nuevo vector, calcularemos  $u'_-(0,0)$

$$u'_-(0,0) = \frac{1}{N} \begin{pmatrix} \gamma_z - |\vec{\gamma}_z| \\ 0 \end{pmatrix}, \text{ recordan } \gamma_z(0) = -q - u < 0$$

(6)

por lo que todos funcionan con  $U'(0,0)$ , tenemos mecanismos cuánticos.

Però si recordem la clase del monopolio, al borrar la muga de debajo de la alfombra, solo la cambiamos de lugar.

Veamos  $b = (\pi, \pi)$

$$U'(\pi, \pi) = \frac{1}{\nu} \begin{pmatrix} \gamma_2 - |\vec{\gamma}_2| \\ 0 \end{pmatrix}, \text{ con } \gamma_2 = 4t - \mu$$

$$\text{si } \gamma_2 > 0, U'(\pi, \pi) = 0$$

es decir con  $4t > \mu$  tendremos una singularidad siempre  
(note que ~~además~~  $U(\pi, \pi)$  es regular)

Calculemos la fase de Berry enredada:

números de Chern

$$\gamma = 2\pi \overset{\uparrow}{C} = \oint_{B^2} dk \Omega = \int_0^{2\pi} dk_x \int_0^{2\pi} dk_y \nabla \times \vec{A} = \oint_{\partial D_1} dk \overset{\uparrow}{A}^{(1)} + \oint_{\partial D_2} dk \overset{\uparrow}{A}^{(2)} = \oint_{\partial D_1} dk \left( \overset{\uparrow}{A}(k) - \overset{\uparrow}{A}^{(2)}(k) \right)$$

STOKES

(7)

$$= \oint_{\partial D_1} d\vec{h} \cdot \nabla \phi(\vec{h})$$

debemos elegir  $\partial D_1$  y calcular  $\phi(\vec{h})$

dijamos un pequeño círculo ~~alrededor~~ en torno al origen.

Nuestra fase de gauge es:

$$\frac{i(\gamma_x + \gamma_z)}{|\vec{\gamma}| + \gamma_z} = e^{i\phi(\vec{h})} = \frac{\gamma_x + i\gamma_y}{|\gamma_x + i\gamma_y|} \cdot \frac{(\vec{\gamma}) + \gamma_z}{|(\vec{\gamma}) + \gamma_z|}^1 = \frac{\Delta \pi_i(h_x) + i\Delta \pi_i(h_y)}{|\Delta \pi_i(h_x) + i\Delta \pi_i(h_y)|} \stackrel{k \rightarrow 0}{=} \frac{h_x + i h_y}{|\vec{h}|} = e^{i\theta}$$

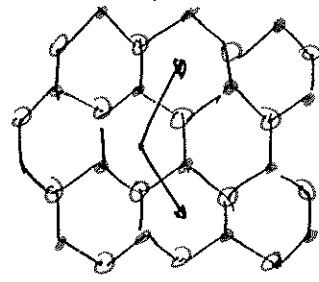
$$\left| \frac{i\gamma_x + \gamma_z}{(\vec{\gamma}) + \gamma_z} \right|$$

$$\Rightarrow \phi(\vec{h}) = \theta(\vec{h})$$

$$\Rightarrow \chi = \oint d\vec{h} \cdot \nabla \theta(\vec{h}) = \int_0^\pi d\theta \cdot \theta = \Theta(\pi) - \Theta(0) = \pi \Rightarrow$$

el número de Chern es no-trivial  
 $C = 1$

## Vacío del grafeno



$$V(\vec{r}) = V(\vec{r} + M\vec{\alpha}_1 + M\vec{\alpha}_2)$$

$$\vec{\alpha}_1 = \alpha \left( \frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2} \right)$$

$$\vec{\alpha}_2 = \alpha \left( \frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right)$$

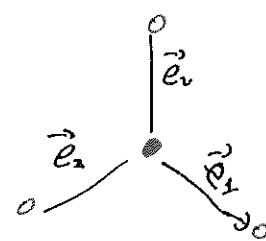
" $\alpha$ " es la distancia entre centros de hexagones.

si " $d$ " es la distancia entre atoms  $\Rightarrow \alpha = \sqrt{3}d$

unido carbon tiene 3 primeros vecinos

(1)

en el plano complejo



$$\vec{\alpha}_2 = i = e^{i\frac{\pi}{2}} = i = (0, \frac{\alpha}{\sqrt{3}})$$

$$\vec{\alpha}_3 = i \cdot e^{i\frac{2\pi}{3}} = i \left( \frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right) = \left( -\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2} \right) \frac{\alpha}{\sqrt{3}}$$

$$\vec{\alpha}_1 = i \cdot e^{i\frac{4\pi}{3}} = i \left( \frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2} \right) = \left( \frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2} \right) \frac{\alpha}{\sqrt{3}}$$

(en el ultimo paso los escalo a la distancia correcta)

$$H_{NN} = -t \sum_i (\alpha_i^+ b_{i+\vec{\alpha}_1} + \alpha_{i+\vec{\alpha}_1}^+ b_i + \alpha_i^+ b_{i+\vec{\alpha}_2} + \alpha_{i+\vec{\alpha}_2}^+ b_i + h.c.)$$

Fairien:

$$\alpha_{r_i}^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \alpha_k^+ e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}_i}$$

$$\alpha_{r_i}^- = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \alpha_k^- e^{-i \vec{k} \cdot \vec{r}_i}$$

$$\alpha_n^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{r_i} \alpha_{r_i}^+ e^{-i \vec{k} \cdot \vec{r}_i}$$

$$\alpha_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{r_i} \alpha_{r_i}^- e^{+i \vec{k} \cdot \vec{r}_i}$$

$$G_{\alpha_k b_k \alpha_{k'} b_{k'}} = \sum_i \left( \frac{1}{N} \sum_k \alpha_k^+ e^{i k \cdot \vec{r}_i} \right) \left( \frac{1}{N} \sum_{k'} b_{k'}^- e^{i \vec{k}' \cdot (\vec{r}_i + \vec{e}_1)} \right)$$

(9)

$$= \frac{1}{N} \sum_{k, k'} \underbrace{e^{i \vec{k} \cdot \vec{e}_1} \alpha_k^+ b_{k'}}_{\delta_{k, k'} \underbrace{\sum_i e^{i \vec{r}_i \cdot (\vec{k} - \vec{k}')}}_{N f(k - k')}} = \sum_k e^{-i \vec{k} \cdot \vec{e}_1} \alpha_k^+ b_k$$

$$\therefore H = -t \sum_k \alpha_k^+ b_k (e^{-i \vec{k} \cdot \vec{e}_1} + e^{-i \vec{k} \cdot \vec{e}_2} + e^{-i \vec{k} \cdot \vec{e}_3}) + h.c.$$

$$H_2 = \sum_k (\alpha_k^+ b_k^+) \begin{pmatrix} \gamma_{11} & \gamma_{21} \\ \gamma_{12} & \gamma_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_k \\ b_k \end{pmatrix}$$

$$\text{or } \gamma_{12} = -t (e^{-i \vec{k} \cdot \vec{e}_1} + e^{-i \vec{k} \cdot \vec{e}_2} + e^{-i \vec{k} \cdot \vec{e}_3}), \gamma_{21} = \gamma_{12}^*$$

$$\gamma_{11} = \gamma_{22} = 0$$

$$\epsilon_{\pm} = \pm |\gamma_n(\vec{k})|$$

$$= \pm \sqrt{3 + 4 \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) - \frac{3 \sin k_y}{2}} + 2 \cos(k_x a)$$

Suponemos  $\epsilon_{\pm} = 0$

si tenemos  $k_y = 0$ :

$$\epsilon_{\pm} = \pm \sqrt{\underbrace{3 + 4 \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right)}_{-\frac{1}{2}} + \underbrace{2 \cos(k_x a)}_{\frac{1}{2}}} = 0$$

$$\Rightarrow \frac{a k_x}{2} = \frac{2\pi}{3} \Rightarrow K = \left(0, \frac{4\pi}{3a}\right)$$

$\epsilon_{\pm}(K) = 0$  y además tiene

simetría triangular

$$\epsilon\left(R\left(\frac{2\pi}{3}\right)K\right) = \epsilon\left(R^2\left(\frac{2\pi}{3}\right)K\right) = 0$$

red respuestas

(10)

$$\vec{F} = M\vec{\omega}_1 + N\vec{\omega}_2 \rightarrow \text{red periódico}$$

$$\vec{k} = \vec{M}\vec{\omega}_1 + \vec{N}\vec{\omega}_2 ? \text{ existe?}$$

1: y además pedimos exigir

$$\vec{\omega}_1 \cdot \vec{\omega}_2 = 2\pi S_{12} \quad (\text{para los } e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}) \\ (\text{para simplificarlos})$$

Tenemos:

~~$$\vec{\omega}_1 = \frac{2\pi}{a} (\vec{\omega}_2 \times \vec{\omega}_3)$$~~ 
$$\vec{\omega}_1 = \frac{2\pi}{a} (\vec{\omega}_2 \times \vec{\omega}_3) \quad \text{y así}$$

$$\vec{\omega}_1 = \left(\frac{a}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}a, 0\right)$$

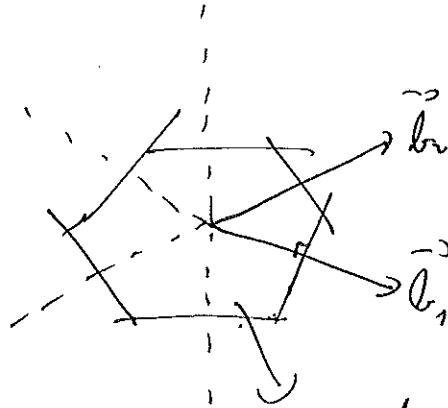
$$\vec{\omega}_2 = \left(\frac{a}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}a, 0\right)$$

$$\vec{\omega}_3 = (0, 0, c) \quad \text{para los otros}$$

$$\vec{\omega}_1 = \frac{2\pi}{a} \left(1, \frac{\sqrt{3}}{3}, 0\right)$$

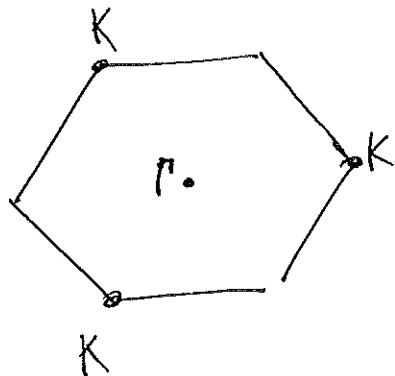
$$\vec{\omega}_2 = \frac{2\pi}{a} \left(1, -\frac{\sqrt{3}}{3}, 0\right)$$

$$\vec{\omega}_3 = \frac{2\pi}{c} (0, 0, 1)$$



Zone de Brillouin  
(primera)

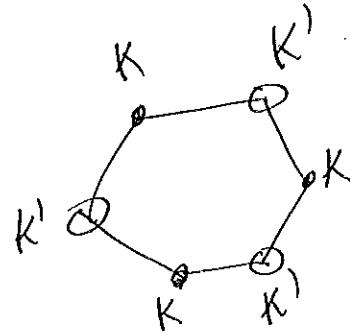
domino básicos de Fourier simetrizado



$$K = \frac{1}{3}\vec{b}_1 + \frac{1}{3}\vec{b}_2 + N\vec{b}_1 + M\vec{b}_2$$

que pase con los demás vértices

(M)



No están conectados por vectores. Pase

pero si nos paramos al centro del hexágono tenemos que

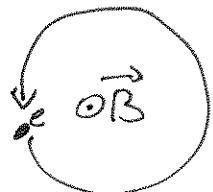
$$\vec{r}_K \rightarrow -\vec{r}_K \quad (\text{que viene de } \vec{r} \rightarrow \vec{r}) \text{ permite conectar}$$

$K$  con  $K'$ . Este es la simetría de invasión

$$\therefore E(K) = E(K') = 0$$

Que pasa con un campo magnético?

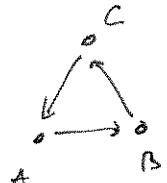
Aheronov - Bohm



el electron cambia de fase  $\phi = \frac{e}{\hbar} \int \vec{B} \cdot d\vec{s}$

$$= \frac{e}{\hbar} \oint \vec{A} \cdot d\vec{l}$$

en una red



$$\phi = \frac{e}{\hbar} \oint \vec{A} \cdot d\vec{l} = \phi_{AB} + \phi_{BC} + \phi_{CA}$$

$$\phi_{AB} = \frac{e}{\hbar} \int_A^B \vec{A} \cdot d\vec{l}$$

$$\phi'_{AB} = \frac{e}{\hbar} \int_A^C \vec{A} \cdot d\vec{l}' = \frac{e}{\hbar} \int_A^B \vec{A} \cdot d\vec{l} + \nabla X \cdot d\vec{l}' = \phi_{AB} + (X_B - X_A) \frac{e}{\hbar}$$

$X_B \rightarrow$  en vector de gluon

pero sobre una curva cerrada

$$\phi_{AB} + \phi_{BC} + \phi_{CA} = \phi'_{AB} + \phi'_{BC} + \phi'_{CA}$$

en un tight binding o material introducir las fueras en los hoppings

$$t \rightarrow t e^{i\phi_{AB}}$$

$$t_{AB} t_{BC} t_{CA} = (t_{AB} || t_{BC} || t_{CA}) e^{i(\phi_{AB} + \phi_{BC} + \phi_{CA})}$$

con  $t_{AB} = t_{BA}^*$  (hermitian)

go ( $t_{AB} \neq t_{BA}$ )

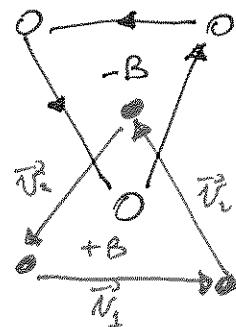
(12)

a Hallone se le da unio en hopping a 2º vecino (nnn)

(13)

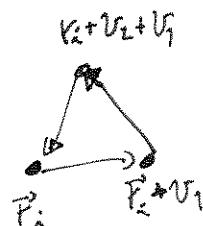
complejo de distintos pines cuales subred

$$H_{\text{nnn}} = -t \left( \sum_{ij} c_i^+ b_j^- \right) + \text{hc.} \quad (\text{graphene})$$



los vectores que describen un loop son

$$\vec{v}_1 = (\alpha, 0), \vec{v}_2 = \left(-\frac{\alpha}{2}, \frac{\sqrt{3}\alpha}{2}\right), \vec{v}_3 = \left(-\frac{\alpha}{2}, -\frac{\sqrt{3}\alpha}{2}\right)$$



$$H_{\text{nnn}} = -t e^{i\phi} \left( \sum_k c_k^+ c_{k+v_1}^+ c_{k+v_1+v_2}^+ c_{k+v_1+v_2+v_3}^+ \right) \\ - t e^{-i\phi} \left( \sum_k b_k^+ b_{k+v_1}^+ b_{k+v_1+v_3}^+ b_{k+v_1+v_3+v_2}^+ \right) + \text{hc.}$$

Fourier:

$$H_{\text{nnn}} = -t e^{i\phi} \sum_k c_k^+ c_{k+h}^+ \left( e^{i\vec{k} \cdot \vec{v}_1} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{v}_2} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{v}_3} \right) \\ - t e^{-i\phi} \sum_k b_k^+ b_{k+h}^+ \left( e^{i\vec{k} \cdot \vec{v}_1} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{v}_2} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{v}_3} \right) + \text{hc.}$$

$$= -2t^2 \sum_k c_k^+ c_{k+h}^+ [\cos(\vec{k} \cdot \vec{v}_1 + \phi) + \cos(\vec{k} \cdot \vec{v}_2 + \phi) + \cos(\vec{k} \cdot \vec{v}_3 + \phi)] \\ - 2t^2 \sum_k b_k^+ b_{k+h}^+ [\cos(\vec{k} \cdot \vec{v}_1 - \phi) + \cos(\vec{k} \cdot \vec{v}_2 + \phi) + \cos(\vec{k} \cdot \vec{v}_3 - \phi)]$$

el objetivo es dejar  $H_{\text{ext}}$  como

$$H_{\text{ext}} = \sum_k (\epsilon_k^+ b_k^+) \alpha_{k\sigma} (\epsilon_k^- b_k^-)$$

$$\text{con } Y_{\text{ext}} = J_0 \cdot \mathbf{I}_{\text{ext}} + J \cdot \vec{\mathbf{r}}$$

un poco mas de algebra

$$H_{\text{ext}} = -2t$$

$$H_{\text{ext}} = \sum_k -2t \epsilon_k^+ \alpha_{k\sigma} (\cos kx_1 \cos \phi + \cos kx_2 \sin \phi + \cos kx_3 \sin \phi - \sin kx_1 \sin \phi - \sin kx_2 \cos \phi - \sin kx_3 \cos \phi)$$

+ ...

recordemos que

$$J_0 = -2t(\cos kx_1 \cos \phi + \cos kx_2 + \cos kx_3) \cos \phi$$

$$J_3 \circ d_z = -2t(\sin kx_1 + \sin kx_2 + \sin kx_3) \sin \phi$$

Sin Hext

$$\epsilon_{\pm}(K) = 0,$$

$$\text{hasta tenemos que } (\epsilon_+ - \epsilon_-)|_K = 6t' \sin(\phi) r_3$$

~~$$\text{pero } d_z(K) = 3\sqrt{3} t' \sin \phi$$~~

$$\text{y } d_z(K') = d_z(-K) = -3\sqrt{3} t' \sin \phi$$

el signo de  $d_z$  cambia con cada velle,  $K, K'$ !

recuerden la discusion de la solucion del  $\mathcal{H}$  de 2x2. paginas ①-⑦.

Aqui ocurre exactamente lo mismo. necesitamos 2 gauge para un  $\mathcal{H}_z$  que cambie de signo

(cuando  $d_x, d_y$  se indefinen)

∴ el orden cuantico es  $\pm 1$

14

resolvemos la simetría de inversión

(asimetría quirial)

de otra forma:

$$f_{\text{pot}} = V \sum e_h^+ e_h - V \sum b_h^+ b_h$$

$$\Rightarrow \sum_k \left( e_h^+ b_h^+ \right) \begin{pmatrix} V & 0 \\ 0 & -V \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_h \\ e_h \end{pmatrix}$$

$$\therefore d_2 = V H b$$

como  $b$  no cambia de signo,

un poco más y es trivial