



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

Estudio de Aislantes Kondo Topológicos y Sistemas Nanoestructurados

Edwin Ramos Rodríguez

Universidad Nacional de Colombia

Facultad de Ciencias, Departamento de Física

Bogotá, Colombia

2019

Estudio de Aislantes Kondo Topológicos y Sistemas Nanoestructurados

Edwin Ramos Rodríguez

Tesis presentada como requisito parcial para optar al título de:
Doctor en Ciencias Física

Director:
PhD. Roberto Emilio Franco Peñaloza

Línea de Investigación:
Física de la Materia Condensada
Grupo de Investigación:
Sistemas Correlacionados

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Ciencias, Departamento de Física
Bogotá D.C., Colombia
2019

Declaración

Me permito afirmar que he realizado la presente tesis de manera autónoma y con la única ayuda de los medios permitidos y no diferentes a los mencionados en la propia tesis. Todos los pasajes que se han tomado de manera textual o figurativa de textos publicados y no publicados, los he reconocido en el presente trabajo. Ninguna parte del presente trabajo se ha empleado en ningún otro tipo de tesis.

Bogotá, D.C., 15 de Marzo de 2019

Edwin Ramos Rodríguez

A mi linda morenita y a mis padres.

La vida inteligente sobre un planeta alcanza su mayoría de edad cuando resuelve su propio problema de la existencia. (El gen egoísta extendido)

Richard Dawkins.

Agradecimientos

A mi madre Maria Margarita Rodríguez de Ramos quien con su cariño y sabiduría me ha enseñado y formado en carácter para afrontar las diferentes situaciones de mi vida, porque siempre ha estado allí apoyándome con su amor y ternura. A mi padre Luis Felipe Ramos Romero, porque con su vida y su humilde trabajo, sin saberlo me inspiro a tomar este amplio camino de la física. A mis hermanos: William, Leydi y Pilar, por incentivar mi mente y no dejar de lado mis sueños, a pesar de las dificultades en cada momento y en cada circunstancia. A mis sobrinos, por dejarme mostrarles un camino diferente de como mejorarse en el tiempo y hacer las cosas mejor para los demás.

A mi orientador: Roberto Emilio Franco Peñaloza, por brindarme su confianza, dedicación y paciencia durante cada uno de estos años de arduo trabajo, porque siempre me brindo el apoyo necesario para avanzar en mi camino.

A los profesores: Jereson Silva Valencia profesor de la Universidad Nacional y Marcos Sergio Figueira de la Universidad federal Fluminense de Brasil, quienes con sus explicaciones, colaboraciones y aportes han contribuido a mi formación académica y culminación de mi trabajo.

A mis amigos por su invaluable apoyo, por estar siempre conmigo principalmente en los peores momentos. Especialmente a Jorge Ignacio Villa, quien me ha acompañado en los momentos de alegría y tristeza, pero más por hacerme saber que siempre puedo contar con él.

A mi linda morenita, mi esposa Liliana Avila Buitrago, por su paciencia y quien siempre ha traído a mi mente las razones suficientes para hacer de este mundo mejor a quien siempre llevo muy dentro de mi corazón y mis mejores pensamientos.

A todos, muchas gracias.

Edwin Ramos Rodríguez.

Resumen

En este trabajo se implementa la aproximación X-boson desarrollada con anterioridad para estudiar una clase de materiales topológicos denominados “aislantes topológicos Kondo”, los cuales presentan novedosas e interesantes propiedades para la materia condensada y los sistemas fuertemente correlacionados a bajas energías. La propiedad topológica de estos materiales se produce mediante la competencia entre las fuertes correlaciones del sistema y la interacción espín-órbita. El eje principal de este trabajo es mostrar las condiciones y parámetros que pueden dar lugar a los aislantes Kondo topológicos. Además se estudian propiedades físicas como conductancias, térmica y eléctrica, termopotencia, conductividad óptica y la contribución de baja energía al espectro de foto-emisión de aislantes Kondo topológicos, en particular el compuesto SmB_6 , teniendo en cuenta la fuerte interacción espín-órbita y la ruptura de simetría de traslación que dan lugar a estados superficiales quirales protegidos topológicamente. Se describe la transición entre los regímenes de valencia intermedia y Kondo para el modelo de Anderson periódico, a temperaturas intermedias y altas (en comparación a la temperatura Kondo); se emplean las aproximaciones de **X**-boson (tratamiento de campo medio) y **A**proximación Atómica (tratamiento esencialmente analítico del tipo *many-body*) para obtener las funciones de Green del sistema. Por otro lado se estudian los efectos de polarización de espín en sistemas de puntos cuánticos con diferentes acoplamientos, para analizar el efecto espín-Seebeck; para esto empleamos la Aproximación Atómica para el modelo de la impureza de Anderson.

Palabras Clave: *Efecto Kondo, Aislantes topológicos, Modelo de Anderson, Termoelectricidad, Estados Superficiales Quirales, Puntos Cuánticos, X-boson, Aproximación atómica para el modelo de Anderson.*

Abstract

In this work it was implemented the X-boson approximation, previously developed to study a kind of topological materials called “topological Kondo insulator”, which show novel and interesting properties for the condensed matter and the strongly correlated systems at low energies. The topological properties in these materials are competitions between the strong correlations and the spin-orbit interactions in the system in the mean field treatment X-boson and the many-body atomic approach. The main axe of this work is to display the optimal condition and parameters that give rise to the topological Kondo insulators. Therefore, we study the physical properties as the electrical and thermal conductances, thermopower, optical conductivity and the low energy contribution to the photoemission spectrum of topological Kondo insulators. In particular, the SmB_6 taking into account the strong spin-orbit coupling and breaking of translation symmetry, given rise to chiral surface states topologically protected. We also describe the intermediary valence and Kondo regime transition in the periodic Anderson model at intermediary and high temperatures as compared with the Kondo temperature. In this study we use the X-boson (mean field treatment) and Atomic approximation (semi-analytical with many body character) to obtain the Green functions. On the other hand, we study the spin polarization effects to analyze the spin-current Seebeck effect in a quantum dot system, employing the Atomic approximation for the single impurity Anderson model.

Keywords: *Kondo effect, topological insulators, Anderson Model, thermoelectricity, chiral surface states, quantum dots, X-boson, atomic approach to Anderson model.*

Lista de Figuras

0.1.	Resistencia en función de la temperatura para una muestra en forma de paralelepípedo de SmB_6 y su correspondiente estructura cristalina. Tomado de Kim <i>et al.</i> ¹	4
1.1.	(Izq.) Efecto Seebeck termoeléctrico ilustración de Alan Stonebraker. (Der.) Efecto Seebeck de corrientes de espín en un material ferromagnético. Tomado de Boona <i>et al.</i> (2014) ² . En efecto termoeléctrico un voltaje se produce por una diferencia de temperatura y es proporcional a un coeficiente S que depende de las propiedades intrínsecas del material. Por otro lado, en el efecto Seebeck de corrientes de espín un voltaje es producido por una diferencia de espines acumulados en los contactos paramagnéticos.	8
1.2.	Comparación entre efecto Seebeck y efecto Seebeck de corriente de espín ³ . (a). Una corriente de calor hace que los portadores con mayor energía por encima de la energía de Fermi fluyan en una dirección (círculo rojo), mientras portadores con menor energía fluyen en dirección contraria (círculo azul). De esta forma se produce un voltaje por compensación de diferencia de portadores cerca al nivel de Fermi. (b). Portadores de carga con espín <i>up</i> con mayor energía fluyen en una dirección contraria al flujo de portadores con espín <i>down</i> generan un voltaje de corriente de espín análogo al efecto Seebeck usual. Tomado de Vera-Marum <i>et al.</i> (2012) ⁴	9
1.3.	Representación gráfica del sistema de espín Seebeck en un punto cuántico inmerso (QD) en un hilo cuántico. Es posible obtener una configuración donde el promedio del potencial químico $\mu_{av} = 0$; con dos divisiones de potenciales químicos de espín en la izquierda del punto cuántico $\Delta\mu_L = \mu_{L,\uparrow} - \mu_{L,\downarrow}$. A la derecha del punto cuántico $\Delta\mu_R = \mu_{R,\uparrow} - \mu_{R,\downarrow}$ en el hilo cuántico a ambos lados del punto cuántico.	10
1.4.	Coefficiente de corriente de espín Seebeck S vs energía del punto cuántico E_{QD} , considerando $T = \Delta$, $U = 0,0\Delta$, para dos valores diferentes de V_s . . .	14
1.5.	Coefficiente de corriente de espín Seebeck S vs energía del punto cuántico E_{QD} , considerando $T = \Delta$, $U = 20,0\Delta$, para dos valores diferentes de V_s . . .	14
1.6.	Coefficiente de corriente de espín Seebeck S vs energía E_{QD} , $U = 20\Delta$, $V_s = 0,02\Delta$, en el rango de altas temperaturas $T \sim \Delta$	15

1.7.	Coeficiente de corriente de espín Seebeck S vs energía E_{QD} , $U = 20\Delta$, $V_S = 0,02\Delta$, en el rango de temperaturas $T \sim 0,1\Delta$	15
1.8.	Coeficiente de corriente de espín Seebeck S vs energía E_{QD} , $U = 20\Delta$, $V_S = 0,02\Delta$, en el rango de temperaturas $T \sim 0,001\Delta$	16
1.9.	Transmitancia vs frecuencia ω con $U = 20,0\Delta$, $V_S = 0,02\Delta$ y $T = 0,001\Delta$, para diferentes valores de energía del punto cuántico (E_{QD}).	16
1.10.	Coeficiente de corriente de espín Seebeck S vs energía E_{QD} , para diferentes valores de V_S con $T = 0,001\Delta$ y $U = 20,0\Delta$	17
1.11.	Coeficiente de corriente de espín Seebeck S vs energía E_{QD} , para diferentes valores de V_S con $T = 0,1\Delta$ y $U = 20,0\Delta$	17
1.12.	Coeficiente de corriente de espín Seebeck S vs energía E_{QD} , para $V_S = 0,02\Delta$, $T = 0,001\Delta$ y diferentes valores de U	17
1.13.	Coeficiente de corriente de espín Seebeck S vs energía E_{QD} , para $V_S = 0,02\Delta$, $T = \Delta$ y diferentes valores de U . Comparando con la figura 1.12 los valores de S son mayores a medida que U aumenta. Estos resultados de Hartree-Fock se consideran sobre estimados debido al truncamiento de las correlaciones, diferente a la aproximación de muchos cuerpos donde se toman todos los valores de las correlaciones para el cálculo de las propiedades.	18
1.14.	S vs V_g para diferentes valores de U con la aproximación de Hartree-Fock usado por Zhi-Cheng Yang <i>et al.</i> (2014) ³ con $V_s = 0,04$ y $T=1$	18
1.15.	S vs V_g para diferentes valores de alta temperatura con $V_s = 4$ y $U = 30$, obtenidos por Zhi-Cheng Yang <i>et al.</i> (2014) ³ , usando la aproximación de Hartree-Fock	19
2.1.	(a) Diagrama de bandas para un aislante Kondo en el camino de puntos de alta simetría $\Gamma - X - \Gamma$ en el <i>inset</i> se muestra la estructura cristalina cúbica para el SmB_6 . (b) Desdoblamiento de bandas de energía de electrones de conducción y estados localizados debido al campo cristalino formando tres bandas de energía E^+ , E_1^- y E_2^- tomado de Harris <i>et al.</i> (2018) ⁵	21
2.2.	(a) Comportamiento de la paridad en los puntos de simetría Γ y X dando lugar a una paridad total impar en el punto de simetría X .(b) Formación de conos de Dirac en los puntos de alta simetría X y Γ vistos en una proyección 2D de la zona de Brillouin. Tomado de Harris <i>et al.</i> (2018) ⁵	22
2.3.	Compuestos de Cerio CeX , con $X = Bi, Sb$. Tomado de Nasser <i>et al.</i> 2016 ⁶ .	23
2.4.	(Izq.) Números de ocupación en la aproximación de <i>slave-boson</i> . (Der.) Números de ocupación en la aproximación de <i>X-boson</i>	27
2.5.	(Izq.) Relación de dispersión de partícula simple para el tratamiento de <i>X-boson</i> usando los parámetros de la densidad de estados <i>X-boson</i> . (Der.) Densidad de estados de los <i>c-electrons</i> para el tratamiento de <i>X-boson</i> y <i>slave-boson</i>	27

<p>3.1. (a) Evolución de niveles de energía para los estados f en el SmB_6, los cuales siguen los trabajos de Baruselli <i>et al.</i> (2014) y Kang <i>et al.</i> (2015)^{7,8}. Los estados f se dividen en $J = 7/2$ y $J = 5/2$ por el acoplamiento espín-órbita. el estado $J = 5/2$, que se encuentra ligeramente por debajo del nivel de Fermi E_F, se divide en los cuartetos Γ_7 y Γ_8 por el efecto de campo cristalino (CF). En medio del camino $\Gamma - X$, el multiplete Γ_8 se divide en los dobletes $\Gamma_8^{(1)}$ y $\Gamma_8^{(2)}$. (b) Esquema del diagrama de bandas para SmB_6 en base a los cálculos obtenidos en las referencias^{1,9,10,11}. La hibridización Kondo entre las bandas Γ_7 y $\Gamma_8^{(1)}$ y la banda de conducción abren dos <i>gaps</i> los cuales son denotados por Δ_1 y Δ_2. Tomado de L. Jiao <i>et al.</i> (2016)¹².</p>	<p>30</p>
<p>3.2. Forma de los orbitales obtenidos del modelo multi-orbital de Anderson empleando la versión generalizada del modelo de <i>tight-binding</i> que clasifica una degeneración por espín de los niveles d ($d_{x^2 - y^2}$ y d_{z^2}) y los multipletes $\Gamma_8^{(1)}$, $\Gamma_8^{(2)}$ y Γ_7 generados por el campo cristalino y la interacción espín-órbita $J = 5/2$. La hibridización en 2D es posible entre los orbitales con la misma simetría $\Gamma_8^{(1)}$ Γ_7 con $d_{x^2 - y^2}$. Tomado de Baruselli <i>et al.</i> (2014)⁷.</p>	<p>31</p>
<p>3.3. Bandas de energía en la aproximación <i>X-boson</i>. Los cálculos fueron obtenidos en los puntos de alta simetría de la zona de Brillouin $\Gamma \rightarrow X \rightarrow M \rightarrow \Gamma$. . .</p>	<p>39</p>
<p>3.4. Densidad de estados de los electrones localizados (ρ_f) y de conducción (ρ_c) con $J_H = 0,0$ por el método <i>X-boson</i>. En el <i>inset</i> se representa la densidad de estados en escala logarítmica que evidencia el carácter <i>V-shape</i> del <i>gap</i> de conducción Kondo topológico.</p>	<p>40</p>
<p>3.5. Densidad de estados para los electrones localizados y de conducción por el método <i>X-boson</i> considerando diferentes valores de J_H y E_f.</p>	<p>40</p>
<p>3.6. Densidad de estados para los electrones localizados y de conducción para el método <i>X-boson</i> para una temperatura $T = 0,0001t$, $J_H = -0,10t$. En el <i>inset</i> se representa la densidad de estados en escala logarítmica para diferentes valores de temperaturas.</p>	<p>41</p>
<p>3.7. Densidad de estados de los electrones localizados $\rho_f(\mu)$ y electrones de conducción $\rho_c(\mu)$ por la aproximación <i>X-boson</i> evaluadas en el potencial químico μ, como función de la energía del nivel localizado E_f. Las letras mayúsculas en la figura representan: la región metálica (Metal) y la región de aislante topológico (AKT o sus siglas en inglés KTI).</p>	<p>41</p>
<p>3.8. Densidad de estados para electrones de conducción y estados localizados por la aproximación <i>X-boson</i> evaluados en el potencial químico $\mu = 0$, como una función de J_H. En el <i>inset</i> se representa la función de correlación Kondo en escala logarítmica.</p>	<p>42</p>

- 3.9. Diagrama de fases para el SmB_6 presión en función de la temperatura T . La fase aislante es delimitada por el gap Δ_g (triángulos rellenos hacia arriba y medida teórica triángulos vacíos hacia arriba) y el ordenamiento magnético (M.O.) con la temperatura, determinado por las medidas de resistividad (cuadros vacíos). Medidas de calorimetría presentaron un comportamiento similar (círculos rellenos). Los triángulos hacia abajo corresponden a la energía de activación de los portadores localizados. datos experimentales obtenidos de Derr *et al.* 2006¹³. 43
- 3.10. Función de correlación Kondo $\langle X_{i\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle$, para diferentes valores de J_H , en función de la energía del estado localizado E_f 44
- 3.11. Correlación Kondo para diferentes valores de temperatura, $\langle X_{i\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle$ en función de la energía del estado localizado E_f 44
- 3.12. Correlación antiferromagnética (SRAFC) por el método X -boson (Izq.) y para *Slave boson* (Der.) siguiendo la ecuación 3.40 $\langle X_{i\alpha}^\dagger X_{j\alpha} \rangle$ vs E_f , para diferentes valores de temperatura. 45
- 4.1. Ilustración de la densidad de estados espectral para compuestos de valencia intermedia observados por espectroscopía de fotoemisión y espectroscopía de fotoemisión inversa. 49
- 4.2. Esquema de diagrama de bandas hibridizadas en un sistema de aislantes Kondo. (a) Las líneas punteadas representan la energía del nivel no hibridizado E_f y la banda de conducción ε_k . La hibridización $c - f$ produce la formación de las bandas de Fermi separada en dos niveles E_g^+ y E_g^- . (b) Densidad de estados renormalizada donde se muestra el gap indirecto cercano al nivel de Fermi. El gap de hibridización ha sido observado en medidas de conductividad óptica con un delgado pico de Drude a bajas frecuencias, separado de una componente interbanda asociada con los electrones de conducción¹⁴. 50
- 4.3. Espectro de fotoemisión para el modelo de aislantes Kondo topológicos en dos dimensiones. Para una energía $E_f = -0,912t$ con ocupación total $N_t = 1,6667$ e interacción $J_H = -0,10t$, parámetros para los cuales se mantiene una condición aislante Kondo topológico. Las figuras inferiores muestran las diferencias de ocupación electrónica alrededor del nivel de Fermi con el cambio de temperatura. ΔT corresponde a la diferencia de las respuestas de PES/IPES en temperatura. 52
- 4.4. Espectros de PES (a) e IPES (b) para $T = 0,01t$, temperatura donde el sistema se encuentra en estado AKT y $T = 0,02t$ para el sistema en estado metálico. (c) y (d) muestran las diferencias de portadores en el nivel de Fermi ($\omega - \mu = 0 - 0t$). (e) corresponde al corrimiento del pico máximo en la respuesta de PES/IPES para las diferentes temperaturas. 53

4.5.	Espectro de fotoemisión para el estado aislante topológico variando las correlaciones de corto alcance (J_H). El <i>inset</i> I/III corresponde a un acercamiento del pico principal en los resultados de PES/IPES. El <i>inset</i> (II) sobresalta la disminución de portadores de carga con la temperatura alrededor del nivel de Fermi, disponibles para el transporte electrónico.	54
4.6.	Resultados experimentales de espectro de fotoemisión para el SmB_6 tomados en las direcciones de los puntos de alta simetría X y Γ para el estudio de <i>in-gap states</i> en diferentes valores de baja temperatura (Neupane <i>et al.</i> 2013) ¹⁵	55
4.7.	Cálculo de PES para los puntos de simetría X (Izq.) y Γ (Der.) para diferentes valores de temperatura. Los <i>insets</i> corresponden al acercamiento en torno al nivel de Fermi.	55
4.8.	Relación de dispersión evaluada en los puntos de alta simetría $\Gamma - X - M - \Gamma$.	56
4.9.	El panel superior corresponde al diagrama de bandas para cada valor J_H en sus respectivos valores de energía que muestra el cono de Dirac. En el panel inferior se muestra la evolución de la respuesta de ARPES en la primera zona de Brillouin con variación de la interacción antiferromagnética entre estados localizados.	60
4.10.	Evolución en temperatura de la señal de ARPES, usando el modelo de <i>X-boson</i> para un AKT con fuertes correlaciones entre estados f . Las temperaturas de arriba hacia abajo y de izquierda a derecha: $T = 1 \times 10^{-4}t$, $T = 5 \times 10^{-3}t$, $T = 1 \times 10^{-2}t$, $T = 2 \times 10^{-2}t$, $T = 3 \times 10^{-2}t$, $T = 0,1t$, $T = 0,2$, $T = 0,5t$ y $T = 1,0t$	62
5.1.	Diagrama de contorno ARPES de los valores absolutos de las autoenergías f y c alrededor del punto de simetría X como función de k_x y k_y en la zona de Brillouin.	65
5.2.	Diagramas de ARPES para diferentes regímenes de temperatura del aislante Kondo topológico SmB_6	67
5.3.	Intensidad espectral parcialmente integrada en momentum ARPES alrededor del punto X , para varias temperaturas, de la ventana del panel de en medio de la figura 5.2 como función de la energía.	68
5.4.	Intensidad espectral de ARPES parcialmente integrada en momentum alrededor del punto de simetría Γ para diferentes valores de temperatura.	69
5.5.	Conductancia diferencial para los electrones de conducción (c), localizados (f) y la suma de los dos electrones como una función del voltaje <i>bias</i> ΔV . Los parámetros empleados en el cálculo son: la energía de los estados localizados $E_f = -0,912t$ con número de ocupación fijado en $N_t = 1,6667$, la interacción antiferromagnética de corto alcance $J_H = -0,10t$ y el valor de la hibridización desnuda (sin dependencia en \mathbf{k}) $V_o = 0,5t$	70

5.6.	Densidad de estados para los electrones de conducción y electrones localizados alrededor del <i>gap</i> topológico para diferentes temperaturas.	71
5.7.	La función de correlación Kondo, $\langle X_{i\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle$, la función de correlación antiferromagnética de corto alcance (SRAFC) $\langle X_{i\alpha}^\dagger X_{j\alpha} \rangle$ y el potencial químico μ como función de la temperatura.	72
5.8.	Calor específico lineal considerando la hibridización constante $V = 0,5t$ y su dependencia en \vec{k} ; el coeficiente lineal del calor específico γ y la densidad de los electrones f y c en el potencial químico como una función de la temperatura. 72	
6.1.	Comparación de la densidad de estados para el sistema con y sin topología calculada en la condición simétrica del modelo ($U = 0,3D$, $E_f = -0,15D = -U/2$, $V = 0,15D$, $T = 10^{-4}D$, $t = D/4$) con ocupación total por sitio de la red $N = 2,0$ a muy bajas temperaturas.	80
6.2.	(Izq.) Densidad de estados para el sistema con topología en escala semi-logarítmica usando los mismos parámetros de la figura 6.1 obtenidos en la aproximación atómica. (Der.) Acercamiento de densidad de estados para los electrones de conducción ($\rho_{\sigma c}$) y electrones localizados ($\rho_{\sigma f}$) en el entorno del potencial químico mostrando estados <i>in-gap</i> para el modelo atómico con topología integrando sobre la zona de Brillouin completa $k_x \times k_y: [-\pi/a : \pi/a]$, con a como el parámetro de red.	81
6.3.	(Izq.) Espectro de fotoemisión (PES/IPES) para el modelo atómico con topología integrado en toda la zona de Brillouin. (Der.) Acercamiento de la respuesta de PES/IPES alrededor del nivel de energía de Fermi.	82
6.4.	Espectro de fotoemisión para los puntos de simetría (Izq.) X y (Der.) Γ calculados en una ventana alrededor del nivel de Fermi $[-0,01 : 0,01]D$	83
7.1.	Conductancia eléctrica en función de la temperatura, con los valores correctos donde se obtiene el estado topológico para cada valor de J_H	87
7.2.	Resistividad vs temperatura para el sistema de Aislante Kondo Topológico para diferentes valores de acoplamiento antiferromagnético J_H . (Izq.) En el estado AKT de $J_H = -0,10t$. (Der.) en el estado topológico con el valor correspondiente para cada J_H . La línea punteada en (Der.) corresponde a la entrada del <i>plateau</i> de los estados superficiales.	88
7.3.	Resultados de resistividad en función de la temperatura con disminución de la resistividad por aplicación de alta presión en dos muestras de mono cristales de SmB_6 , muestran una transición de fase de líquido de Fermi a aislante Kondo alrededor de $\sim 4GPa$. Las figuras son tomadas del trabajo experimental de Yazhou Zhou <i>et. al.</i> (2017) ¹⁶ . (a) y (b) son dos muestras diferentes de SmB_6 y (c) muestra el cambio de la temperatura donde se obtiene el <i>plateau</i> (T^*) de los estados superficiales.	89

7.4.	Conductividad térmica para el aislante Kondo topológico. (a) En estado topológico $J_H = -0,10t$ y (b) en el estado topológico para cada J_H	90
7.5.	Termopotencia (S) para AKT en función de la temperatura para el estado topológico (Izq.) con $J_H = -0,10t$ y (Der.) para el estado topológico de cada uno de los diferentes valores de J_H	90
7.6.	Derivada del número de ocupación de la función de Green cruzada respecto a la temperatura. Este cálculo permite encontrar las desviaciones del número de ocupación para notar la temperatura de transición a la cual ocurre el paso de estado Kondo a estado topológico.	91
7.7.	Ley de Wiedemann-Franz en función de la temperatura para diferentes valores de J_H en el estado aislante Kondo topológico de cada valor de J_H con número de ocupación constante $N_t = 1,6667$	91
7.8.	Figura térmica de mérito para aislantes Kondo topológicos en el estado topológico de (Izq.) $J_H = -0,10t$. (Der.) En el estado topológico de cada valor de J_H	92
A.1.	Esquema del procedimiento del cálculo del método de X -boson para el estudio del aislante Kondo topológico.	96
B.1.	Esquema del procedimiento del cálculo para método de atómico en el estudio del aislante Kondo topológico.	97
D.1.	Desdoblamiento debido a la interacción espín órbita y el campo cristalino en un aislante Kondo topológico. La interacción espín órbita es más fuerte que el campo cristalino en este tipo de sistemas Kondo.	100

Lista de Tablas

- 1.1. Representación de las posibles transiciones presentes en el límite atómico con U finito para el modelo de la impureza de Anderson. $I_x = 1, 3$ destruye un electrón con espín *up* y $I_x = 2, 4$ destruye un electrón con espín *down*. El espín de los electrones de conducción es representado como $\sigma = \pm$, mientras que para los estados localizados es representado por $\sigma = \uparrow, \downarrow$ 12

Índice general

Agradecimientos	VII
Resumen	IX
Lista de figuras	XI
Lista de tablas	XIX
0. Introducción	3
I. Efecto Seebeck de espín en nanoestructuras	7
1. Efecto Seebeck debido a corrientes de espín	8
1.0.1. Modelo para el Efecto de espín Seebeck	10
1.1. Modelo	11
1.2. Corriente de espín y coeficiente Seebeck	13
1.3. Resultados y discusión	14
1.4. Conclusiones	18
II. Aislantes Kondo Topológicos	20
2. Aproximación X-boson para Aislantes Kondo topológicos	21
2.1. Resultados	26
3. Interacción de corto alcance entre estados localizados en un Aislante Kondo Topológico	29
3.1. Potencial termodinámico para el <i>X-boson</i>	34
3.2. Resultados	38
3.2.1. Estudio de la densidad de estados	39
3.2.2. Correlación Kondo vs. Correlación antiferromagnética f - f	43
3.3. Conclusiones y perspectivas	46

4. Propiedades ópticas de Aislantes Kondo topológicos	48
4.0.1. Número de ocupación	50
4.1. Resultados para el Espectro de fotoemisión	51
4.2. Espectroscopía de fotoemisión con resolución angular	55
4.2.1. Resultados de ARPES con variación de interacciones AFM de corto alcance.	56
4.2.2. Resultados de ARPES con variación en temperatura	57
5. Estados superficiales o in-gap states en el SmB_6	63
5.1. Modelo para <i>in-gap states</i>	63
5.2. Espectroscopia de fotoemisión de resolución angular para los <i>in-gap states</i> .	66
5.3. Calor específico	69
6. Estudio de estados in-gap de Aislantes Kondo Topológicos usando el Modelo Atómico	73
6.0.1. Implementación de la topología en el modelo Atómico.	78
6.1. Resultados	79
6.1.1. Espectro de fotoemisión del modelo atómico.	81
7. Propiedades termoeléctricas en Aislantes Kondo Topológicos	84
7.1. Propiedades de transporte para la red en el Modelo de Anderson Periódico .	84
7.2. Resultados	87
8. Conclusiones generales.	93
A. Implementación del método X-boson	96
B. Implementación del método Atómico	97
C. Operadores de Hubbard	98
D. Factor de Forma	100
E. Demostración Interacción tipo Heisemberg	102
E.1. Parte A	103
E.2. Parte B	104
F. Obtención de multiplicadores de Lagrange	106
F.1. Potencial Termodinámico	106
G. Números de ocupación	108
Bibliografía	110

Lista de Abreviaciones

AFM: Antiferromagnético.
AKT: Aislante Kondo topológico.
ARPES: Espectro de fotoemisión con resolución angular (*Angle Resolve Photoemission Spectroscopy*).
AT: Aislante topológico.
ATC: Aislante topológico cristalino.
 J_H : Parámetro de interacción antiferromagnética.
IPES: Espectro de fotoemisión inverso.
PES: Espectro de fotoemisión
QD: Punto cuántico (*Quantum Dot*).
M. O.: Ordenamiento magnético *Magnetic Order*.
MAP: Modelo de Anderson Periódico.
SMD: Semimetáles de Dirac.
SBMFT: Teoría de campo medio. Slave boson *Slave Boson Mean Field Theory* .
SOC: Acoplamiento espín órbita, (*Spin Orbit Coupling*).
SRAFC: Correlación antiferromagnética de corto alcance (*Short Range Antiferromagnetic correlation*).
TRS: : Simetría de inversión temporal (*Time Reversal Symmetry*).
WFL: Ley de Wiedemann-Franz.
ZT: Figura térmica de mérito.

0. Introducción

Los aislantes topológicos (AT) son una nueva clase de materiales topológicos que han atraído la atención tanto de físicos teóricos como experimentales en los últimos años^{17,18,19,20,21,22,23}. Destacando el premio nobel concedido en 2016 a los físicos David J. Thouless, F. Duncan, M. Haldane y J. Michael Kosterlitz, “por sus aportes al descubrimiento de las fases topológicas y sus transiciones en la materia”^{24,25,26,27,28}. Esta nueva línea de investigación es el resultado de aplicar la “maquinaria” matemática de la teoría de campos topológicos en la descripción de fenómenos físicos, dando lugar a la aparición de nuevas fases en la materia que con teorías usuales (sin topología) no se encuentran. Además, proporciona una riqueza fenomenológica en las propiedades impuestas por la ruptura o conservación de ciertas simetrías en la materia²⁹. El entendimiento de la aparición y la manipulación de la transición de estas fases genera nuevos caminos de estudio, otras formas de entender la materia y también permite la fabricación de nuevos materiales y tecnología en transporte de información cuántica^{30,31,32} como producto de este entendimiento. La característica más destacada de los materiales topológicos es la existencia simultánea de estados superficiales (*gapless surface states*) protegidos topológicamente y un *gap* del estado aislante en el *bulk*, como consecuencia de la topología no trivial de las funciones de onda en el *bulk*³³. Estos estados superficiales, además de ser conductores son protegidos por la simetría de inversión temporal (TRS: *Time Reversal Symmetry*) lo cual previene de efectos de dispersión por impurezas no magnéticas. Contrario al efecto Hall clásico donde el campo magnético rompe la simetría de inversión temporal. El caso a estudiar es análogo al efecto Hall cuántico de espín, donde el *role* del campo magnético es llevado a cabo por el acoplamiento espín-órbita de la estructura de bandas del material^{34,35}. Lo cual, desde el punto de vista práctico, es interesante para aplicaciones en la espintrónica por sus bajas pérdidas por disipación de energía causadas por retrodispersión³⁶.

El mejor ejemplo para explicar las fases topológicas es el efecto Hall cuántico entero, en el cual los estados superficiales quirales (que poseen una dirección específica) dan lugar a la conductividad Hall, que puede ser medida en términos de invariantes topológicas como el número Chern o Z_2 ²⁶. Esta invariante se mantiene inmutable bajo deformaciones adiabáticas siempre que el *gap* en el *bulk* no se cierre. La razón principal de este efecto es la fuerte interacción espín-órbita como ocurre en sistemas de pozos cuánticos de $InAs/GaSb$ ^{20,37} y $HgTe/CdTe$ ³⁸, lo cual aumento el interés en investigar los efectos de la interacción espín-

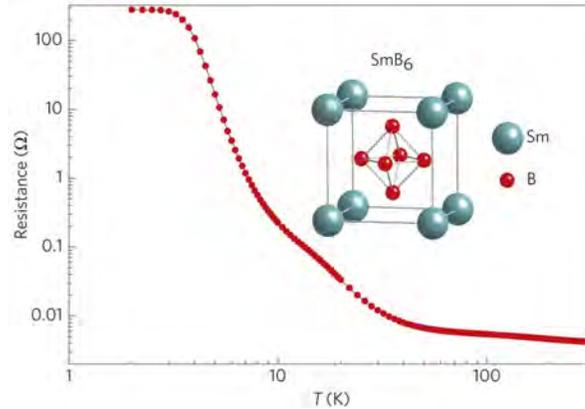


Figura 0.1.: Resistencia en función de la temperatura para una muestra en forma de paralelepípedo de SmB_6 y su correspondiente estructura cristalina. Tomado de Kim *et al.*¹.

órbita en otros sistemas de estructuras electrónicas semimetálicas, superconductores, sistemas fermiónicos y bosónicos.

El amplio espectro de implementaciones de la topología en sistemas de la materia condensada, llevó al hallazgo de otros nuevos fenómenos como cuasipartículas de Bogoliubov en superconductores que tienen propiedades como de partículas de Majorana, interesantes para la computación cuántica³⁹, semimetales de Dirac⁴⁰ y semimetales de Weyl⁴¹. Todos los anteriores se pueden entender a partir de Hamiltonianos no interactuantes, definiéndolos como materiales topológicos débiles, mientras que aquellos sistemas donde se incluyen fuertes correlaciones son poco conocidos. Recientemente, se han discutido sistemas que incluyen, tanto fuertes correlaciones como topología. Un ejemplo de este tipo de alta controversia en los últimos años es el SmB_6 , el cual corresponde a un aislante Kondo de estructura cúbica altamente correlacionado de valencia mezclada ($Sm^{2+} - 4f^6$ y $Sm^{3+} - 4f^5$), donde se presentan transiciones metal-aislante a bajas temperaturas (ver figura 0.1). Por debajo de la temperatura de transición (temperatura Kondo $T_K \sim 10K$ en el SmB_6 puede variar hasta 15K dependiendo la forma y el ancho de la muestra⁴²) la resistencia del material aumenta exponencialmente a medida que la temperatura es disminuida, sin embargo alrededor de los 4K este aumento en resistencia es interrumpido por un *plateau* que puede estar asociado a un estado metálico en el *gap* aislante. Es muy difícil entender la aparición de estos estados metálicos en la superficie. Una propuesta es atribuir estos estados conductores a una señal de aislante topológico correlacionado. Los aislantes Kondo o semiconductores Kondo, son típicamente compuestos de tierras raras, que a bajas temperaturas “abren” un *gap* en torno al nivel de Fermi, asociado a la hibridización entre los estados localizados y los electrones de conducción. Esto les otorga un carácter aislante semiconductor a bajas temperaturas, pero con masas efectivas muy altas (del orden de $100 m_e$) para los portadores de carga⁴³. Recientemente, se han descubierto surgimientos de estados topológicos superficiales en sis-

temas aislantes Kondo tradicionales^{15,44,45,46,47,48}, cabe anotar que el surgimiento de estos estados superficiales metálicos quirales topológicamente protegidos, se deriva de la interacción espín-órbita análogo a los AT no correlacionados, asociados a la estructura electrónica del material. En aislantes Kondo, la interacción Kondo altera la curvatura de la estructura de bandas a bajas temperaturas, originando masas efectivas muy altas. Es decir, la interacción Kondo genera un cambio en la estructura electrónica y por lo tanto, se espera que altere indirectamente la conformación de los estados superficiales metálicos quirales, como una alternativa de control experimental de estos, debido a la presencia o ausencia del efecto Kondo se puede “activar” por medio de la temperatura del sistema o por la presencia de un campo magnético externo, lo que podría ser de mucho interés tecnológico.

Varios trabajos teóricos recientes^{44,45,46,47,48} han abordado el estudio de aislantes Kondo topológicos, empleando hamiltonianos en base al modelo de Anderson periódico (PAM), con tratamientos tipo campo medio como el denominado bosón esclavo (*slave-boson treatment*), el cual es exacto en el límite Kondo con muy fuerte correlación coulombiana. Sin embargo, el sistema a estudiar, el SmB_6 , presenta un carácter de valencia intermediaria, el cual es correcto estudiarlo en regímenes intermediarios como se muestran en algunos trabajos teóricos y experimentales^{49,50,51,52,53,54,55}. A esta característica se suman, las fuertes correlaciones Kondo e interacciones entre estados localizados, lo cual genera un sistema con más preguntas sin resolver a pesar de la extensa literatura que se ha escrito. Por ejemplo, la existencia de estados superficiales asociados con la topología que en esta tesis exploramos a partir de los modelos propuestos, iniciando por el tratamiento de X-boson.

Este tratamiento presenta la ventaja de ser relativamente simple matemáticamente, permite incorporar los efectos asociados a la interacción espín-órbita y la topología del sistema, además de describir los diferentes regímenes presentes en el mismo. Sin embargo, presenta la desventaja de describir el sistema solamente a muy bajas temperaturas, pues a medida que se incrementa la temperatura, se manifiesta una transición de fase espuria (no física), asociada al límite de validez del tratamiento⁵⁶.

En esta tesis, se trabajan dos tipos de sistemas desarrollados dentro del marco de los sistemas fuertemente correlacionados empleando los métodos aproximados *X-boson* y atómico. En el primer sistema estudiado se describe el efecto Seebeck producido por corrientes de espín en un punto cuántico inmerso en un hilo cuántico. Este estudio se realiza usando la aproximación atómica para el modelo de la impureza de Anderson. En el segundo sistema el estudio es más profundo y se enfoca en los efectos que pueden causar los estados topológicos superficiales en los aislantes Kondo a bajas temperaturas, se calculan las propiedades ópticas como: espectro de fotoemisión (PES/IPES), espectro de fotoemisión con resolución angular (ARPES) de compuestos aislantes Kondo, en particular SmB_6 , y por último se obtienen las propiedades

termoeléctricas que describen las características principales del transporte electrónico. De igual forma se abordan los cálculos para describir el comportamiento de los estados dentro del *gap* generados en el aislante Kondo topológico empleando inicialmente el tratamiento tipo campo medio con la aproximación *X-boson* y posteriormente haciendo una descripción tipo *many-body* característica del *método atómico*.

El régimen de energías que abarca este estudio comprende las temperaturas bajas, intermedias y altas (comparadas con la temperatura Kondo). Dentro de los cálculos se incorpora la correlación electrónica fuerte entre estados localizados (J_H), además de la hibridización entre los estados localizados y la banda de conducción dependiente de la interacción espín-órbita [$V(\mathbf{k})$].

Parte I.

**Efecto Seebeck de espín en
nanoestructuras**

1. Efecto Seebeck debido a corrientes de espín

En esta sección se estudia el efecto Seebeck producido por una corriente de espín en un punto cuántico inmerso en un hilo cuántico, empleando el método atómico para correlación finita (U -finito) en el modelo de la impureza de Anderson.

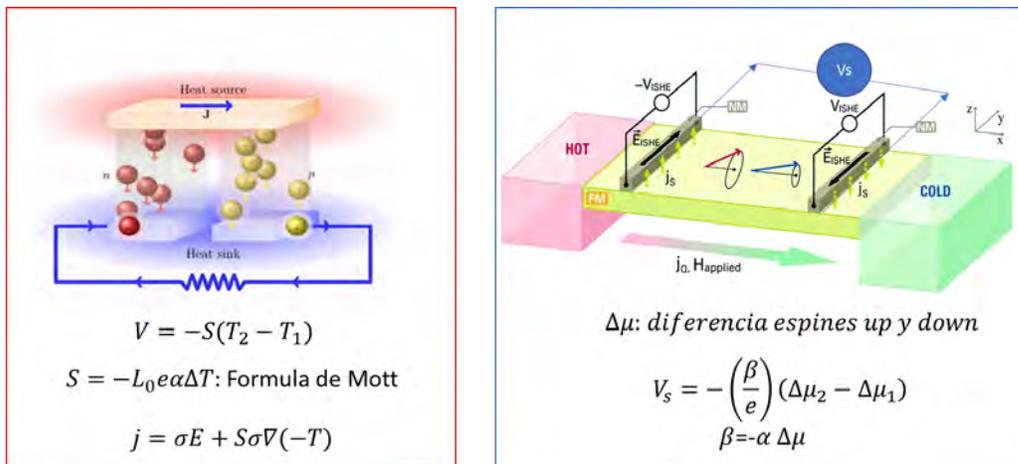


Figura 1.1.: (Izq.) Efecto Seebeck termoeléctrico ilustración de Alan Stonebraker. (Der.) Efecto Seebeck de corrientes de espín en un material ferromagnético. Tomado de Boona *et al.* (2014)². En efecto termoeléctrico un voltaje se produce por una diferencia de temperatura y es proporcional a un coeficiente S que depende de las propiedades intrínsecas del material. Por otro lado, en el efecto Seebeck de corrientes de espín un voltaje es producido por una diferencia de espines acumulados en los contactos paramagnéticos.

Los gradientes de temperatura en metales generan voltajes eléctricos como se muestra en la figura (Izq.). A éste fenómeno se le conoce como efecto Seebeck y la eficiencia es medida por el coeficiente Seebeck S ^{57,58}

$$S = \frac{V}{\Delta T}. \quad (1.1)$$

El coeficiente Seebeck de corrientes de espín se genera a partir de diferencias de espines como

se muestra en la figura (Der.). El coeficiente Seebeck se determina por la tasa de dispersión y la densidad de electrones de conducción. En el caso de las propiedades de transporte en nanoestructuras, es determinada por los coeficientes de Onsager⁵⁹ como se ha realizado en trabajos anteriores como en E. Ramos *et al.* (2014)⁶⁰.

Éste fenómeno es aprovechado para caracterizar materiales, porque provee información de la diferencia de energía entre los estados de transporte y el nivel de Fermi, en contraste con la conductividad eléctrica que solamente suministra información de la densidad de estados cerca al nivel de Fermi⁶¹. Son amplias las aplicaciones de este efecto en generadores de potencia eléctrica, sensores térmicos e investigaciones en materiales para obtener altos valores de termopotencia^{62,63}. La diferencia principal entre el efecto Seebeck, y el efecto Seebeck de espín, es la naturaleza del voltaje producido. Mientras el efecto Seebeck genera un voltaje eléctrico, el efecto Seebeck de espín genera un voltaje de espín^{64,65,66,67,68} (ver Figura 1.2).

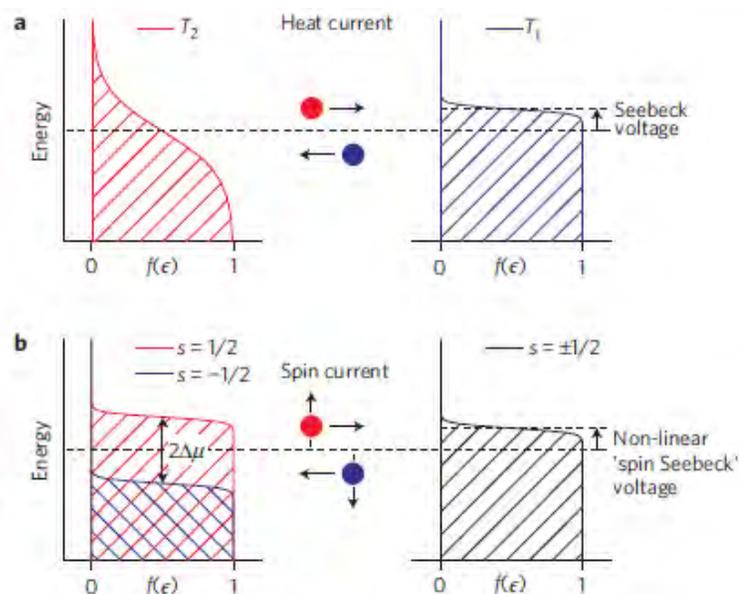


Figura 1.2.: Comparación entre efecto Seebeck y efecto Seebeck de corriente de espín³. (a). Una corriente de calor hace que los portadores con mayor energía por encima de la energía de Fermi fluyan en una dirección (círculo rojo), mientras portadores con menor energía fluyen en dirección contraria (círculo azul). De esta forma se produce un voltaje por compensación de diferencia de portadores cerca al nivel de Fermi. (b). Portadores de carga con espín *up* con mayor energía fluyen en una dirección contraria al flujo de portadores con espín *down* generan un voltaje de corriente de espín análogo al efecto Seebeck usual. Tomado de Vera-Marum *et al.* (2012)⁴.

En la figura 1.3 se representa gráficamente el sistema del punto cuántico inmerso en un canal

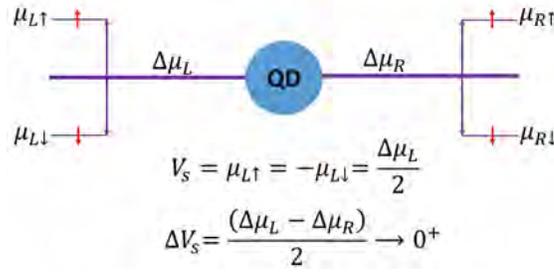


Figura 1.3.: Representación gráfica del sistema de espín Seebeck en un punto cuántico inmerso (QD) en un hilo cuántico. Es posible obtener una configuración donde el promedio del potencial químico $\mu_{av} = 0$; con dos divisiones de potenciales químicos de espín en la izquierda del punto cuántico $\Delta\mu_L = \mu_{L,\uparrow} - \mu_{L,\downarrow}$. A la derecha del punto cuántico $\Delta\mu_R = \mu_{R,\uparrow} - \mu_{R,\downarrow}$ en el hilo cuántico a ambos lados del punto cuántico.

de conducción (hilo cuántico) para estudiar los efectos del espín Seebeck en el transporte electrónico del sistema. En el sistema se observa una división del potencial químico por espín (*up* y *down*) a cada lado del canal de conducción atravesando el punto cuántico⁴. En el canal de la izquierda del punto cuántico la división de espín (V_s) es ligeramente mayor que el canal del lado derecho, de esta forma la corriente de espín cruza el punto cuántico generando un voltaje *bias* ΔV_s

$$V_S = \mu_{L,\uparrow} - \mu_{L,\downarrow} = \frac{\Delta\mu_L}{2}, \quad \Delta V_S = \frac{(\Delta\mu_L - \Delta\mu_R)}{2} \rightarrow 0^+. \quad (1.2)$$

De forma similar como se define el coeficiente Seebeck se define también una corriente de espín de efecto Seebeck adimensional como³

$$S = \frac{-Ve}{(\Delta\mu_R - \Delta\mu_L)}, \quad (1.3)$$

donde $\Delta\mu_{R,L}$ es la división de espín del potencial químico, a la izquierda (L) y a la derecha (R) del punto cuántico, e es la carga del electrón y V es el voltaje de espín.

1.0.1. Modelo para el Efecto de espín Seebeck

El hamiltoniano del sistema puede ser escrito por el modelo de Anderson reescrito en términos de los operadores de Hubbard (ver apéndice C)

$$H = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \sum_{\alpha=L,R} E_{\mathbf{k},\sigma}^{\alpha} c_{\mathbf{k},\sigma}^{\alpha\dagger} c_{\mathbf{k},\sigma}^{\alpha} + \sum_{\sigma} E_{f\sigma} X_{\sigma\sigma} + \sum_{\alpha=L,R} \sum_{\mathbf{k},\sigma} V_{\alpha} \left(X_{0\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\sigma}^{\alpha} + c_{\mathbf{k},\sigma}^{\alpha\dagger} X_{0\sigma} \right) + (E_{f\sigma} + U) X_{dd}, \quad (1.4)$$

el primer término representa los conectores cuánticos a izquierda y derecha del punto cuántico que no interactúan entre sí, caracterizados por electrones de conducción a izquierda (L) y derecha (R). El segundo término describe el punto cuántico caracterizado por el estado localizado con energía $E_{f\sigma} = E_{QD}$. El tercer término corresponde al tunelamiento entre el punto cuántico y los conectores semi-infinitos de derecha (R) e izquierda (L), la hibridización $V_\alpha = V_{L,R} = V$ corresponde al elemento de matriz de tunelamiento entre los conectores y el punto cuántico, el cual es considerado constante por simplicidad. El último término representa la interacción de Coulomb en el punto cuántico, asociado a la doble ocupación $X_{dd} = c_d^\dagger c_d = n_d$ en el punto cuántico (c_d corresponde al operador destrucción en estado localizado d). El hamiltoniano es escrito en términos de los operadores de Hubbard X los cuales proyectan el espacio de Hilbert del sistema al estado propio de los estados localizados del punto cuántico como se describe en el apéndice C.

1.1. Modelo

Se emplea la aproximación atómica para solucionar el modelo de Anderson, la cual genera funciones de Green que describen la física del efecto Kondo en sistemas fuertemente correlacionados^{69,70}. Las funciones de Green exactas para los electrones localizados f , válidas tanto para el modelo de Anderson periódico como para el modelo de la impureza, pueden ser escritas en términos de la ecuación de Dyson⁶⁹, como sigue:

$$\mathbf{G}_\sigma^f = \mathbf{M}_\sigma \cdot (\mathbf{I} - \mathbf{A}_\sigma)^{-1}, \quad (1.5)$$

donde $\mathbf{A}_\sigma = \mathbf{W}_\sigma \cdot \mathbf{M}_\sigma$ y \mathbf{M}_σ son los cumulantes efectivos. Invertiendo la ecuación 1.5, se obtiene \mathbf{M}_σ

$$\mathbf{M}_\sigma = (\mathbf{I} + \mathbf{G}_\sigma^f \cdot \mathbf{W}_\sigma)^{-1} \cdot \mathbf{G}_\sigma^f, \quad (1.6)$$

y para la impureza ubicada en el origen, \mathbf{W}_σ es dado por

$$\mathbf{W}_\uparrow(z) = |V|^2 \varphi_\uparrow(z) \mathbf{I}, \quad (1.7)$$

$$\mathbf{W}_\downarrow(z) = |V|^2 \varphi_\downarrow(z) \mathbf{I}', \quad (1.8)$$

donde

$$\mathbf{I} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{I}' = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (1.9)$$

Para una banda rectangular con ancho medio D , definida en el intervalo $[A, B]$, con $B = A + 2D$ la función de Green asociada a los electrones de conducción con espín σ corresponde a la siguiente ecuación

$$\varphi_\sigma(z) = \frac{1}{2D} \ln \left(\frac{z - B + \mu}{z + A + \mu} \right). \quad (1.10)$$

Las funciones de Green pueden ser expresadas en términos de los cumulantes que son asociados con las transiciones representada en la Tabla 1.1.

Tabla 1.1.: Representación de las posibles transiciones presentes en el límite atómico con U finito para el modelo de la impureza de Anderson. $I_x = 1, 3$ destruye un electrón con espín *up* y $I_x = 2, 4$ destruye un electrón con espín *down*. El espín de los electrones de conducción es representado como $\sigma = \pm$, mientras que para los estados localizados es representado por $\sigma = \uparrow, \downarrow$.

I_x	1	2	3	4
$\alpha = (b, a)$	(0, +)	(0, -)	(-, d)	(+, d)

$$\mathbf{G}_{\uparrow}^f(i\omega) = \frac{\mathbf{M}_{13}^{\text{at}}(i\omega) - |V|^2 \varphi_{\uparrow}(i\omega) (m_{11}m_{33} - m_{13}m_{31}) \mathbf{I}'}{1 - |V|^2 \varphi_{\uparrow}(i\omega) (m_{11} + m_{33} + m_{13} + m_{31})}, \quad (1.11)$$

$$\mathbf{G}_{\downarrow}^f(i\omega) = \frac{\mathbf{M}_{24}^{\text{at}}(i\omega) - |V|^2 \varphi_{\downarrow}(i\omega) (m_{22}m_{44} - m_{24}m_{42}) \mathbf{I}}{1 - |V|^2 \varphi_{\downarrow}(i\omega) (m_{22} + m_{44} + m_{24} + m_{42})}, \quad (1.12)$$

donde

$$\mathbf{M}_{13}^{\text{at}}(i\omega) = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{13} \\ m_{31} & m_{33} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{M}_{24}^{\text{at}}(i\omega) = \begin{pmatrix} m_{22} & m_{24} \\ m_{42} & m_{44} \end{pmatrix} \quad (1.13)$$

$$\mathbf{G}_{\sigma}^{f,at} = \mathbf{M}_{\sigma}^{\text{at}} \cdot (\mathbf{I} - \mathbf{W}_{\sigma}^{\text{o}} \mathbf{M}_{\sigma}^{\text{at}})^{-1}, \quad (1.14)$$

y de esta ecuación se obtiene el cumulante exacto $\mathbf{M}_{\sigma}^{\text{at}}$

$$\mathbf{M}_{\sigma}^{\text{at}} = (\mathbf{I} + \mathbf{G}_{\sigma}^{f,at} \cdot \mathbf{W}_{\sigma}^{\text{o}})^{-1} \cdot \mathbf{G}_{\sigma}^{f,at}, \quad (1.15)$$

con

$$\mathbf{W}_{\uparrow}^{\text{o}}(z) = |\Delta|^2 \varphi_{\uparrow}^{\text{o}}(z) \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (1.16)$$

$$\mathbf{W}_{\downarrow}^{\text{o}}(z) = |\Delta|^2 \varphi_{\downarrow}^{\text{o}}(z) \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (1.17)$$

y $\varphi_{\sigma}^{\text{o}}(z) = \frac{-1}{z - \varepsilon_{\sigma} - \mu}$. Esta ecuación corresponde al colapso de la banda localizada en ε_{σ} , llamada la función de Green “desnuda”.

En el cálculo computacional, se fija el potencial químico en $\mu = 0$ y se varía el nivel atómico de conducción ε_0 de forma que satisfaga la regla de suma de Friedel, que en esencia garantiza el cumplimiento de los principios de conservación de la energía, la carga y el momentum en el proceso de dispersión mecánico cuántico de los electrones itinerantes por el QD , asegurando que el sistema se describa en un sistema líquido de Fermi⁶⁹

$$\rho_{f\sigma}(\mu) = \frac{\sin^2(\pi n_{f\sigma})}{\Delta\pi}, \quad (1.18)$$

donde $\rho_{f,\sigma}(\mu)$ es la densidad de estados del nivel localizado en el potencial químico y $n_{f,\sigma}$ es el número de ocupación por espín del estado localizado.

1.2. Corriente de espín y coeficiente Seebeck

Siguiendo el artículo de Zhi-Cheng Yang *et. al.* (2014)³, la corriente eléctrica con polarización de espín σ puede ser escrita como^{71,72}

$$J_\sigma = \frac{ie}{2\pi\hbar} \int [f_{L\sigma}(\omega) - f_{R\sigma}(\omega)] \tau_\sigma(\omega) d\omega, \quad (1.19)$$

donde $f_{\alpha\sigma}(\omega) = \frac{1}{\exp[(\omega - \mu_{\alpha\sigma})/k_B T] + 1}$ es la función de distribución de Fermi-Dirac con espín electrónico σ del conector α , $\mu_{\alpha\sigma}$ es el potencial químico de los electrones en el conductor α con espín σ , y $\tau_\sigma(\omega)$ es el coeficiente de transmisión para los electrones con espín σ , el cual puede ser escrito como

$$\tau_\sigma(\omega) = \Gamma^2 |G_{00,\sigma}(\omega)|^2. \quad (1.20)$$

Aquí $G_{00,\sigma}(\omega)$ es la función de Green local en el QD , la función de Green para el caso particular del QD inmerso está dada por

$$G_{00,\sigma}(\omega) = (G_\sigma^c(\omega))^2 V^2 G_\sigma^f(\omega), \quad (1.21)$$

$\Gamma = \frac{V^2}{\Delta}$ con $\Delta = \pi V^2 \rho_c(\mu)$, corresponde al ancho de la mezcla entre QD y los conductores, y $\rho_c(\omega) = \frac{1}{2D}$ es la densidad de estados para la banda de conducción asociada con los conductores descrita por un canal balístico.

El coeficiente Seebeck S se define de la misma forma que lo hicieron Zhi-Cheng Yang *et. al.* (2014)³:

$$S = \frac{\int [(\frac{\partial f}{\partial \omega})|_{\mu_{\uparrow}} \tau_{\uparrow}(\omega) - (\frac{\partial f}{\partial \omega})|_{\mu_{\downarrow}} \tau_{\downarrow}(\omega)] d\omega}{\int [(\frac{\partial f}{\partial \omega})|_{\mu_{\uparrow}} \tau_{\uparrow}(\omega) + (\frac{\partial f}{\partial \omega})|_{\mu_{\downarrow}} \tau_{\downarrow}(\omega)] d\omega}. \quad (1.22)$$

Esta cantidad es el principal objeto de estudio, todos los resultados numéricos son obtenidos empleando esta expresión.

1.3. Resultados y discusión

Como se discute en el *paper* de Zhi-Cheng Yang *et al.*³, es posible obtener una configuración donde el promedio del potencial químico es cero $\mu_{av} = 0$, con la división del potencial químico para cada espín tanto a la izquierda ($\Delta\mu_L = \mu_{L,\uparrow} - \mu_{L,\downarrow}$) como a la derecha ($\Delta\mu_R = \mu_{R,\uparrow} - \mu_{R,\downarrow}$) del QD . La división del potencial químico por espín es simétrica respecto al promedio ($\mu_{av} = 0$). El parámetro $V_S = \mu_{L,\uparrow} = -\mu_{L,\downarrow} = \frac{\Delta\mu_L}{2}$. ec. 1.22 fue obtenida bajo la condición $\Delta V_S = \frac{(\Delta\mu_L - \Delta\mu_R)}{2} \rightarrow 0^+$, esto es $\Delta\mu_L \rightarrow \Delta\mu_R$ ³. Se asume que la división del potencial químico por espín es ligeramente mayor al lado izquierdo que el lado derecho ($\Delta V_S \rightarrow 0^+$), de esta forma la configuración produce un voltaje *bias* a través del QD . Los niveles de energía del QD pueden ser “sintonizados” variando el voltaje V_{gate} , el cual es proporcional a la energía del QD , (E_{QD}). Los parámetros escogidos fueron: $\Delta = \pi V^2 \rho_c(\mu) = \frac{\pi V^2}{2D} = 1$, $D = 100\Delta$ es el ancho medio de la banda de conducción, U es la repulsión electrónica de Coulomb dentro del QD , expresadas en unidades de Δ .

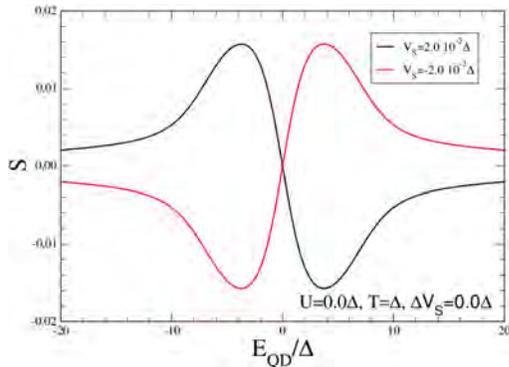


Figura 1.4.: Coeficiente de corriente de espín Seebeck S vs energía del punto cuántico E_{QD} , considerando $T = \Delta$, $U = 0,0\Delta$, para dos valores diferentes de V_s .

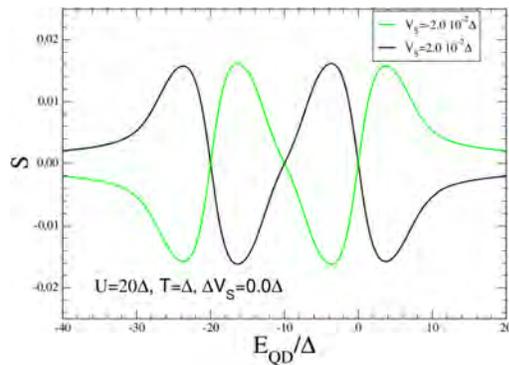


Figura 1.5.: Coeficiente de corriente de espín Seebeck S vs energía del punto cuántico E_{QD} , considerando $T = \Delta$, $U = 20,0\Delta$, para dos valores diferentes de V_s .

Las figuras 1.4 y 1.5 muestran el coeficiente Seebeck S vs. la energía de QD (E_{QD}) para dos diferentes valores antisimétricos de V_S , considerando la repulsión Coulombiana $U = 0,0$ (Fig.1.4) y $U = 20\Delta$ (Fig.1.5). En ambos casos un comportamiento oscilatorio prueba que el coeficiente Seebeck de corriente de espín es sensible a la polarización y presenta una forma antisimétrica³, una condición que se asocia a la simetría de partícula-hueco del sistema. Sin embargo, en el caso interactuante ($U = 20\Delta$) se presenta una estructura de tres ceros en las oscilaciones, ausente en los resultados de Hartree-Fock con condiciones similares³. En la figura 1.5, de derecha a izquierda, la región alrededor del primer cero es asociada con la entrada del primer electrón al QD , el segundo cero es equivalente a la condición simétrica ($E_{QD} = -\frac{U}{2}$), mientras el tercer cero surge de la entrada del segundo electrón al QD . El efecto Kondo no está presente en esta figura debido a las condiciones de alta temperatura respecto a la temperatura Kondo (T_K). Los resultados obtenidos son similares a los obtenidos por aproximación de campo medio para el caso no interactuante ($U = 0$)³.

En las figuras 1.6, 1.7 y 1.8 se estudia el coeficiente Seebeck para temperaturas altas, intermedia y bajas respectivamente. El interés en este caso es detectar la emergencia del efecto Kondo a medida que la temperatura decrece. En la figura 1.6, el pico Kondo está ausente y los valores del coeficiente S son bajos, a temperaturas intermedias en la figura 1.7, algunos picos “satélites” parecen ser precursores de la emergencia del efecto Kondo. Finalmente, en la figura 1.8, se presentan dos picos alrededor de $E_{QD} \simeq -20,0\Delta$ y $E_{QD} \simeq 0,0\Delta$, los cuales son un sello de la presencia del efecto Kondo. Para esta región S se incrementa en un orden de magnitud cuando es comparado con los resultados a altas temperaturas (figura 1.6).

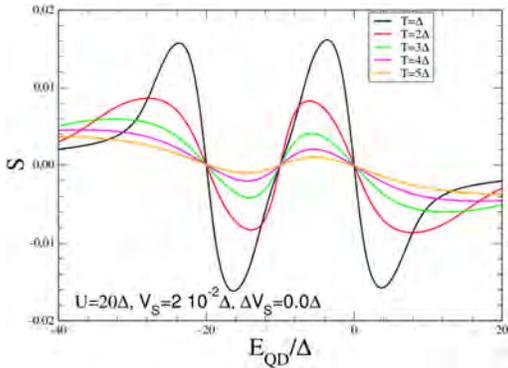


Figura 1.6.: Coeficiente de corriente de espín Seebeck S vs energía E_{QD} , $U = 20\Delta$, $V_S = 0,02\Delta$, en el rango de altas temperaturas $T \sim \Delta$.

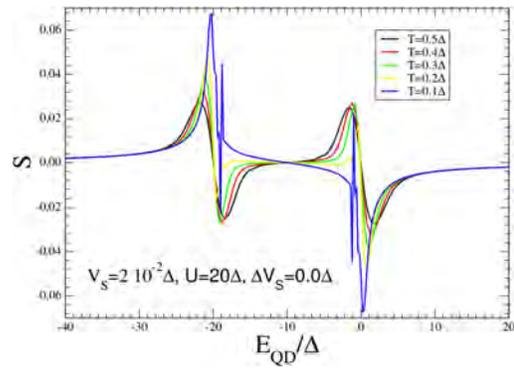


Figura 1.7.: Coeficiente de corriente de espín Seebeck S vs energía E_{QD} , $U = 20\Delta$, $V_S = 0,02\Delta$, en el rango de temperaturas $T \sim 0,1\Delta$

Con el fin de entender el comportamiento del coeficiente Seebeck a bajas temperaturas,

se calcula el coeficiente de transmisión para algunos valores significativos de E_{QD} como se muestra en la figura 1.9. Para $E_{QD} = -10,0\Delta$ que corresponde al límite simétrico del modelo de la impureza de Anderson (línea roja): en los extremos se tienen las contribuciones de dos sub-bandas de Hubbard y en el centro donde el potencial químico $\mu = 0,0\Delta$ aparece la contribución del pico Kondo. En este límite el sistema presenta simetría partícula-hueco y la contribución a S tiende a cero. Considerando el límite simétrico como una referencia, el efecto Kondo desaparece gradualmente a medida que el voltaje de *gate* E_{QD} varía a izquierda o derecha. Debido a la hibridización entre las sub-bandas y el pico Kondo, la transmitancia presenta un ensanchamiento para $E_{QD} = -20,0\Delta$ y $E_{QD} = 0,0\Delta$, lo cuál coincide con el incremento de S para dichos valores de E_{QD} . Lo cuál permite concluir que los picos presentes en S en los valores correspondientes al límite simétrico en E_{QD} son resultado del efecto Kondo.

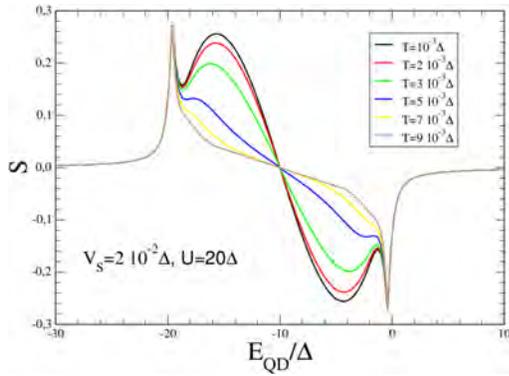


Figura 1.8.: Coeficiente de corriente de espín Seebeck S vs energía E_{QD} , $U = 20\Delta$, $V_S = 0,02\Delta$, en el rango de temperaturas $T \sim 0,001\Delta$.

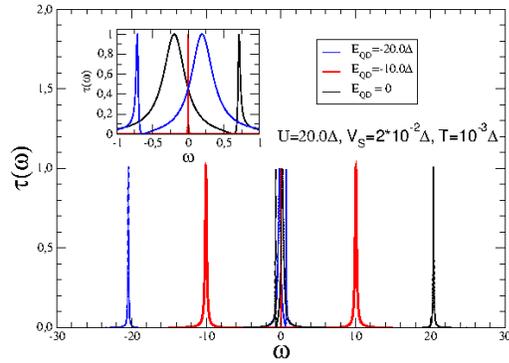


Figura 1.9.: Transmitancia vs frecuencia ω con $U = 20,0\Delta$, $V_S = 0,02\Delta$ y $T = 0,001\Delta$, para diferentes valores de energía del punto cuántico (E_{QD}).

En las figuras 1.10 y 1.11 se muestra el coeficiente S vs E_{QD} para diferentes valores de V_S y temperaturas de $T = 0,001\Delta$ (1.10) y $T = 0,1\Delta$ (1.11), cuando V_S decrece, el valor del coeficiente S tiende a cero. Como se discutió con la transmitancia, la forma de las curvas están relacionadas con la emergencia del pico Kondo a bajas temperaturas. Esta forma de “pico” ausente en los resultados de campo medio³, y por lo tanto corresponde a un carácter de muchos cuerpos en el sistema.

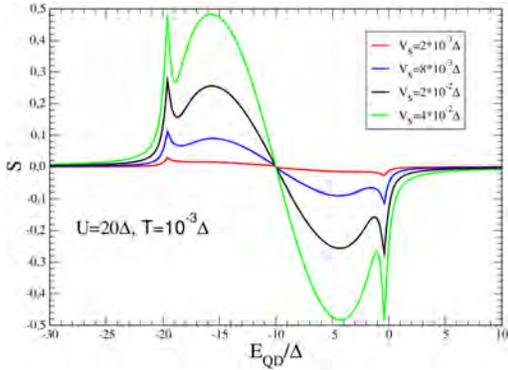


Figura 1.10.: Coeficiente de corriente de espín Seebeck S vs energía E_{QD} , para diferentes valores de V_S con $T = 0,001\Delta$ y $U = 20,0\Delta$.

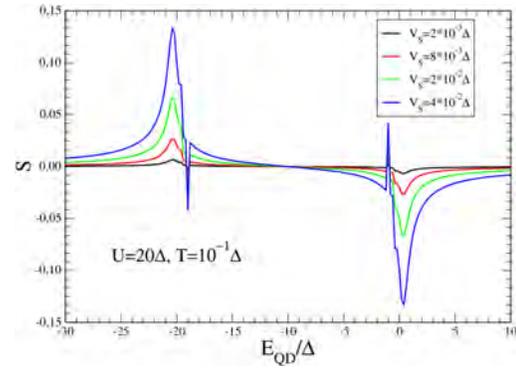


Figura 1.11.: Coeficiente de corriente de espín Seebeck S vs energía E_{QD} , para diferentes valores de V_S con $T = 0,1\Delta$ y $U = 20,0\Delta$.

La figura 1.12 muestra el comportamiento de S respecto a E_{QD} para diferentes valores de correlación a $T = 0,001\Delta$. El resultado es similar a el obtenido en la referencia³ (ver figura 1.14) donde emplean la aproximación de Hartree-Fock. Este aumento de S cuando se incrementa U a bajas temperaturas puede ser asociado al bloqueo de Coulomb que contribuye a la polarización de espín en el QD . Aunque exhibe una forma diferente debido a la emergencia del efecto Kondo, los resultados presentan la misma tendencia de bajas temperaturas que en la referencia³. Sin embargo, para altas temperaturas el decrecimiento de los valores de S como se indica en la figura 1.13 son contrarios a los obtenidos por Zhi-Cheng Yang et al. (2014)³ (figuras 1.14 y 1.15). Éste resultado puede estar relacionado a la sobre estimación de las correlaciones electrónicas en la aproximación de campo medio.

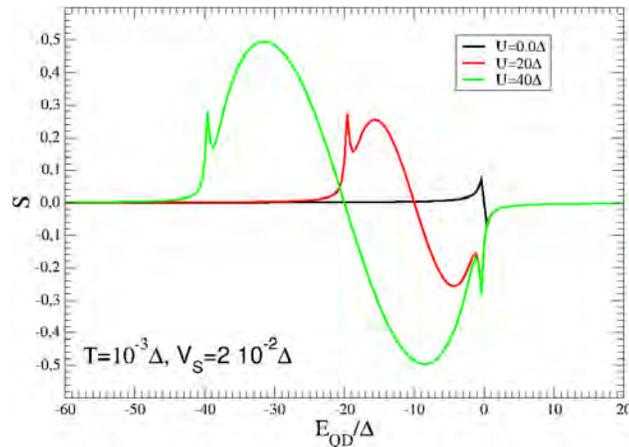


Figura 1.12.: Coeficiente de corriente de espín Seebeck S vs energía E_{QD} , para $V_S = 0,02\Delta$, $T = 0,001\Delta$ y diferentes valores de U .

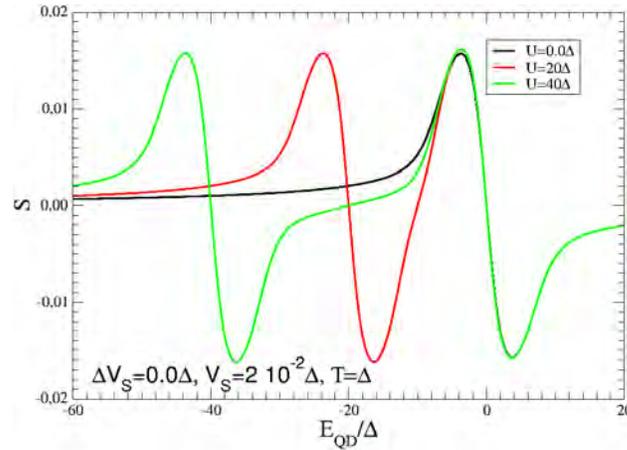


Figura 1.13.: Coeficiente de corriente de espín Seebeck S vs energía E_{QD} , para $V_S = 0,02\Delta$, $T = \Delta$ y diferentes valores de U . Comparando con la figura 1.12 los valores de S son mayores a medida que U aumenta. Estos resultados de Hartree-Fock se consideran sobre estimados debido al truncamiento de las correlaciones, diferente a la aproximación de muchos cuerpos donde se toman todos los valores de las correlaciones para el cálculo de las propiedades.

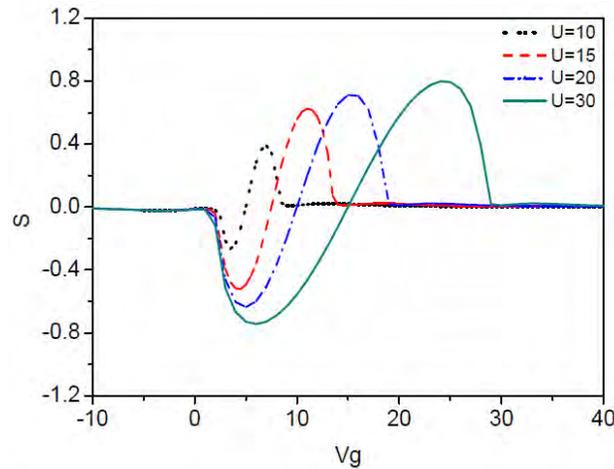


Figura 1.14.: S vs V_g para diferentes valores de U con la aproximación de Hartree-Fock usado por Zhi-Cheng Yang et al. (2014)³ con $V_s = 0,04$ y $T=1$.

1.4. Conclusiones

Se estudió el efecto de corriente de espín empleando la aproximación atómica para el modelo de la impureza de Anderson, con el fin de describir funciones de Green asociadas al problema. Éste tratamiento tiene un carácter de muchos cuerpos, ausente en tratamientos de campo medio como la aproximación de Hartree-Fock. En el regimen de bajas temperaturas, los

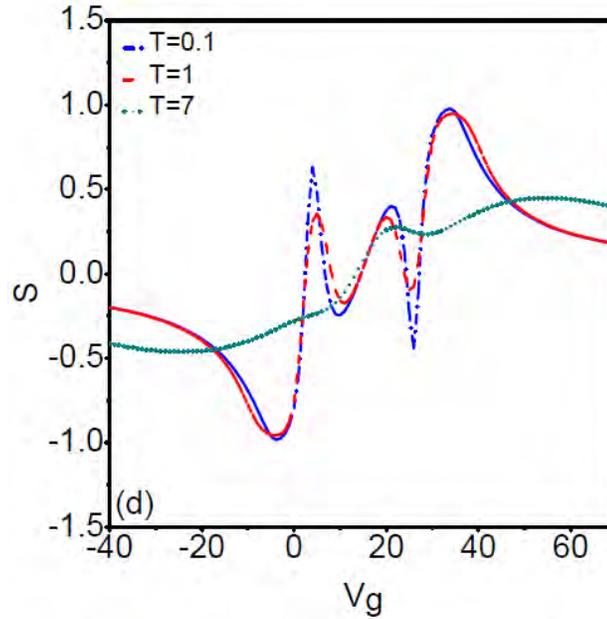


Figura 1.15.: S vs V_g para diferentes valores de alta temperatura con $V_s = 4$ y $U = 30$, obtenidos por Zhi-Cheng Yang et al. (2014)³, usando la aproximación de Hartree-Fock

resultados están gobernados por la emergencia del pico Kondo en la transmitancia, el cual define el comportamiento del coeficiente S como una función de los parámetros del modelo. El coeficiente S es antisimétrico, condición asociada con el efecto bipolar usual en la termopotencia, y es causado por la simetría de partícula-hueco del sistema. Los resultados confirman que S es sensible a los diferentes estados de polarización del QD^3 , un aspecto útil para distinguir las diferentes condiciones de polarización experimentalmente. Además, los resultados sugieren que el incremento del valor de S con el incremento de la correlación U es válido solamente para bajas temperaturas. Los altos valores de S obtenidos por la aproximación de Hartree-Fock³ son probablemente sobre estimados.

La ventaja de nuestro tratamiento es la evidencia de las fuertes correlaciones a bajas temperaturas ausentes en el tratamiento de Hartree-Fock³. Experimentalmente es posible realizar este tipo de dispositivos con materiales con fuerte acoplamiento espín-órbita que permiten la división de espines en los bordes, las corrientes generadas tienen una quiralidad definida y desigualdad de espines debidos las anisotropías propias del material, generan un voltaje que puede ser medido. De acuerdo a nuestro tratamiento es posible calcular esta desigualdad de espines y de esta forma controlar las corrientes y voltajes generados importantes para la espintrónica.

Parte II.

Aislantes Kondo Topológicos

2. Aproximación X-boson para Aislantes Kondo topológicos

La estructura electrónica de un aislante Kondo consiste de una banda de electrones de conducción (curva azul en la figura 2.1a) centrada en el punto X , la cual se hibridiza con estados localizados (curva roja en 2.1a). Los estados f y c son contribución de los átomos de Sm , los cuales forman una celda unitaria cúbica *inset* 2.1a. A medida que la temperatura decrece, la banda de conducción (ϵ_d) es dividida por el campo cristalino en ϵ_{f_1} y ϵ_{f_2} y a su vez se hibridizan para formar tres bandas E^+ , E_1^- , E_2^- separadas por algunos meV como se muestra en la figura 2.1b⁵.

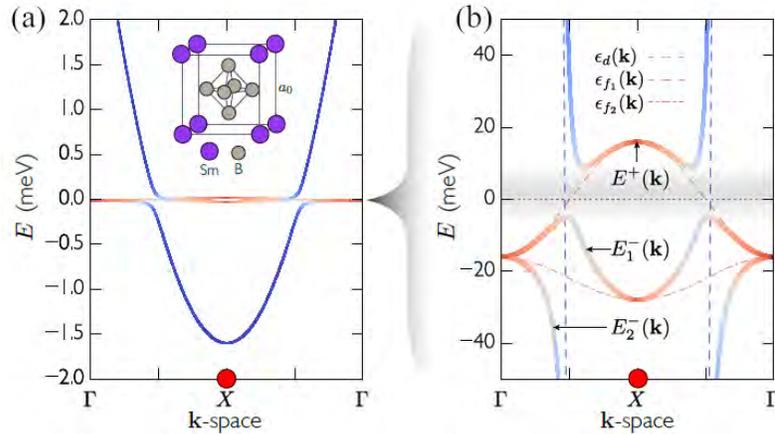


Figura 2.1.: (a) Diagrama de bandas para un aislante Kondo en el camino de puntos de alta simetría $\Gamma - X - \Gamma$ en el *inset* se muestra la estructura cristalina cúbica para el SmB_6 . (b) Desdoblamiento de bandas de energía de electrones de conducción y estados localizados debido al campo cristalino formando tres bandas de energía E^+ , E_1^- y E_2^- tomado de Harris *et al.* (2018)⁵.

La invariante topológica para la estructura electrónica de los aislantes Kondo es calculada de un producto de paridades de valores propios los cuales son opuestos para la banda de conducción y la banda de estados localizados. El parámetro de hibridización $|V(\mathbf{k})|^2$ posee nodos en los puntos X y Γ como indica la figura superior en 2.2a, los cuales llevan a un carácter puro de bandas hibridizadas d (de conducción) o f en esos puntos de alta simetría.

Las bandas llenas E_1^- , E_2^- tienen un carácter completamente f en Γ como se muestra en la figura del panel central en 2.2a. En el punto X estas bandas se envuelven con carácter d o f . De esta forma la paridad total δ es invertida solamente en el punto X como se muestra en el panel inferior de 2.2a. La estructura cúbica de un aislante Kondo topológico tiene una inversión de paridad en todos los tres puntos X como se marca en los puntos rojos de 2.2b en la zona de Brillouin dando un índice topológico $\nu = \delta_\Gamma \delta_R (\delta_X \delta_M)^3 = -1$ el cual resguarda el estado de aislante topológico fuerte (*strong topological state*). Cuando es proyectado sobre una zona de Brillouin de 2D las inversiones se manifiestan en Γ y X y consecuentemente los puntos de Dirac adquieren diferentes velocidades debido a la equivalencia de proyecciones en la superficie 2D de la zona de Brillouin como se muestran en los elipses azul y verdes del panel superior en 2.2b⁵.

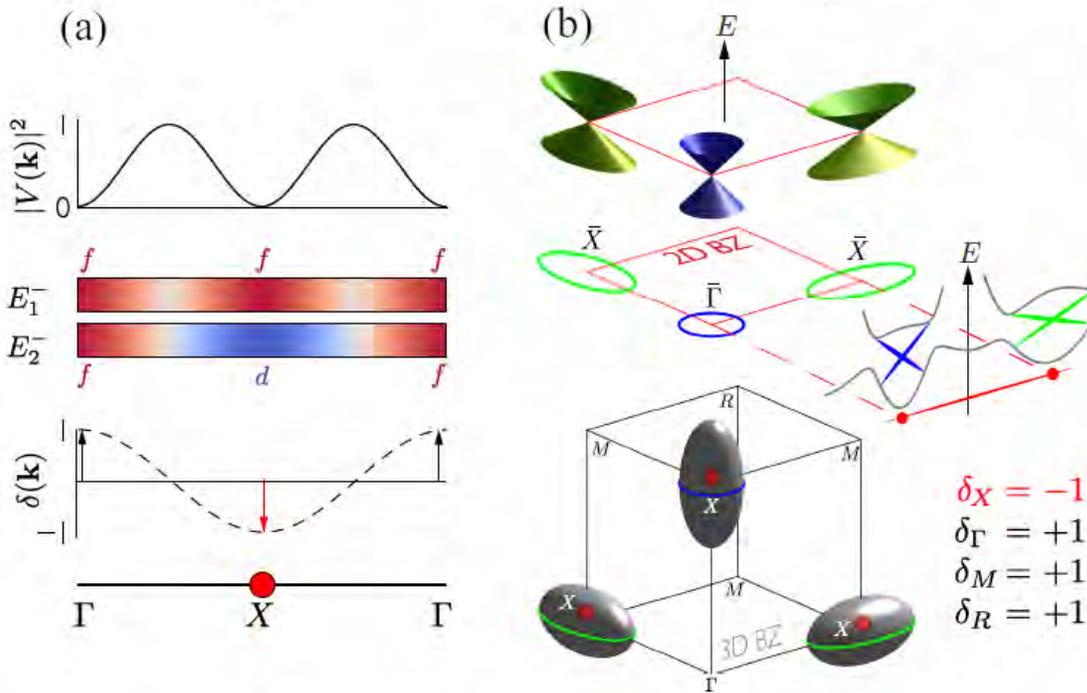


Figura 2.2.: (a) Comportamiento de la paridad en los puntos de simetría Γ y X dando lugar a una paridad total impar en el punto de simetría X .(b) Formación de conos de Dirac en los puntos de alta simetría X y Γ vistos en una proyección 2D de la zona de Brillouin. Tomado de Harris *et al.* (2018)⁵

En una primera aproximación para los aislantes Kondo topológicos se estudia una red cuadrada 2D, adecuada para tratar compuestos fuertemente correlacionados como Cerio (*Ce - based*)⁴⁸. Representando el Hamiltoniano en términos de operadores de Hubbard⁷³, con el fin de “proyectar” el Hamiltoniano en el espacio de Hilbert de los estados localizados del sistema, para el modelo de Anderson periódico tenemos:

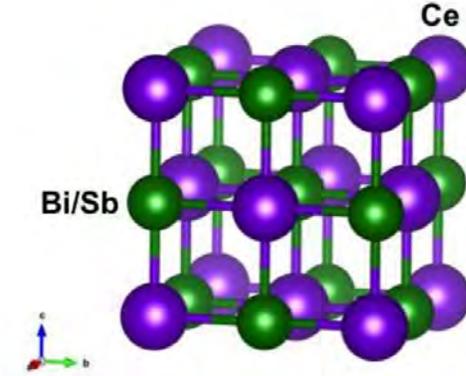


Figura 2.3.: Compuestos de Cerio CeX , con $X = Bi, Sb$. Tomado de Nasser *et al.* 2016⁶.

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} E_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{j\alpha} E_{f,j\alpha} X_{j,\alpha} + \sum_{j\alpha,\mathbf{k}\sigma} \left(V_{\sigma\alpha}(\vec{k}) X_{j,0\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} + V_{\sigma\alpha}^*(\vec{k}) c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger X_{j,0\alpha} \right), \quad (2.1)$$

el primer término corresponde al Hamiltoniano de los electrones de conducción (*c-electrons*), con momentum \vec{k} y espín σ , el segundo término corresponde a los electrones localizados (*f-electrons*), con pseudoespín α pertenecientes a la representación de algún estado de multiplete Γ en el sitio j (definido en el apéndice D). El último término es el Hamiltoniano de hibridización entre los *c-electrons* y los *f-electrons*; en iones de tierras raras, el proceso de hibridización es un resultado del *hopping* entre los electrones f del sitio j y los electrones de conducción en la vecindad más cercana de este sitio. La hibridización ($V_{\sigma\alpha}(\vec{k})$) es determinada siguiendo la representación de Γ considerando el multiplete de la estructura con $j = 5/2$, la matriz de hibridización puede escribirse como:

$$V_{\sigma\alpha}(\vec{k}) = V[\Phi]_{\sigma\alpha}(\vec{k}), \quad (2.2)$$

donde $[\Phi]_{\sigma\alpha}(\vec{k})$ es el factor de forma asociado con la dependencia no trivial de la estructura de la hibridización con \vec{k} , siguiendo la derivación usada por Tran *et al.* (2012)⁴⁷ el factor de forma se escribe como el producto

$$[\Phi]_{\sigma\alpha}(\vec{k}) = \Phi(\mathbf{k}) = \vec{d}(k) \circ \vec{\sigma}, \quad (2.3)$$

donde para una red cuadrada 2D $\vec{d}(k) = 2[\sin(k_x), \sin(k_y)]$ y $\vec{\sigma}$ son las matrices de Pauli (véase apéndice D).

Las funciones de Green obtenidas de la generalización de la aproximación *X-boson* para el caso de la red son dadas por

$$G_{\mathbf{k}\sigma,\alpha}^{ff}(z_n) = \frac{-D_\alpha(z_n - \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma})}{(z_n - \tilde{E}_{f\alpha})(z_n - \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}) - |V_{\sigma\alpha}(\vec{k})|^2 D_\alpha}, \quad (2.4)$$

$$G_{\mathbf{k}\sigma,\alpha}^{cc}(z_n) = \frac{-\left(z_n - \tilde{E}_{f\alpha}\right)}{\left(z_n - \tilde{E}_{f\alpha}\right)\left(z_n - \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}\right) - |V_{\sigma\alpha}(\vec{k})|^2 D_\alpha}, \quad (2.5)$$

$$G_{\mathbf{k}\sigma,\alpha}^{fc}(z_n) = \frac{-D_\alpha V_{\sigma\alpha}(\vec{k})}{\left(z_n - \tilde{E}_{f\alpha}\right)\left(z_n - \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}\right) - |V_{\sigma\alpha}(\vec{k})|^2 D_\alpha}. \quad (2.6)$$

donde $z = \omega + i\eta$ y las raíces están descritas por

$$\omega_{\mathbf{k}\sigma}(\pm) = \frac{1}{2} \left[(\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} + \tilde{E}_{f\alpha}) \pm \sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} - \tilde{E}_{f\alpha})^2 + 4|V|^2 D_\alpha \Delta^2} \right], \quad (2.7)$$

con

$$\tilde{E}_{f\alpha} = E_{f\alpha} + \Lambda; \quad \text{y} \quad \Delta^2 = \frac{1}{2} \text{Tr}[\Phi(\mathbf{k}) \cdot \Phi^\dagger(\mathbf{k})]. \quad (2.8)$$

El término $\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}$ se calcula por *tight-binding* considerando una banda de conducción independiente del espín para una red cuadrada 2D y empleando el parámetro de *hopping* entre vecinos más cercanos $t = 1$.

$$\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} = -2t[\cos(k_x) + \cos(k_y)]. \quad (2.9)$$

Las correlaciones se cargan a la cantidad $D_\alpha = R + n_{f,\alpha}$, donde $R = \langle X_{00} \rangle$ y $n_{f,\alpha} = \langle X_{\alpha\alpha} \rangle$, equivalen a los números de ocupación de los estados vacío (0) y estados con espín α . D_α se calcula auto-consistentemente (como se muestra en el apéndice A) a través de la minimización del potencial termodinámico ($\Omega = -k_B \ln(Q)$, Q : función de partición gran canónica) con respecto al parámetro R , al mismo tiempo que $\tilde{E}_{f\alpha}$ con Λ como el multiplicador de Lagrange asociado a satisfacer la conservación local de la probabilidad (completez) en el tratamiento X-boson (ver apéndice F).

$$\Lambda = \frac{-V^2}{\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x \int_{-\pi}^{\pi} dk_y \Delta^2 \frac{n_F[\omega_{\mathbf{k},\sigma}(+)] - n_F[\omega_{\mathbf{k},\sigma}(-)]}{\sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} - \tilde{E}_{f\alpha})^2 + 4|V|^2 D_\alpha \Delta^2}}, \quad (2.10)$$

aquí $n_F(z)$ es la función de distribución de Fermi-Dirac

$$n_F(z) = \frac{1}{1 + e^{\beta z}}. \quad (2.11)$$

Después del cálculo numérico del parámetro Λ se calculan los números de ocupación ($n_{j,a} = \langle X_{j,aa} \rangle$) empleando las funciones de Green (2.4, 2.5, 2.6) a través de la relación de identidad

$$X_{j,00} + X_{j,\alpha\alpha} + X_{j,\bar{\alpha}\bar{\alpha}} = I_j, \quad (2.12)$$

donde, α es la componente de espín y $\bar{\alpha}$ la componente se espín opuesta. De la ecuación 2.12 obtenemos la completez

$$\sum_{\alpha} \langle X_{j,\alpha,\alpha} \rangle = \langle X_{j,00} \rangle + \langle X_{j,\alpha\alpha} \rangle + \langle X_{j,\bar{\alpha}\bar{\alpha}} \rangle = 1, \quad (2.13)$$

y se procede a calcular el parámetro $R = D_{\alpha} - n_{f,\alpha}$. Todos los cálculos se repiten hasta conseguir la convergencia de Λ y R simultáneamente. La aproximación de campo medio es introducida en el parámetro

$$R = \langle X_{j,00} \rangle = \langle b_j^{\dagger} b_j \rangle \quad (2.14)$$

La densidad de estados se obtiene numéricamente a través de la relación

$$\rho(\omega) = \frac{-1}{\pi} \Im \int_{-\pi}^{\pi} dk_x \int_{-\pi}^{\pi} dk_y \frac{1}{\omega - \omega_{\mathbf{k}\sigma}(\pm) + i\eta^+} \quad (2.15)$$

donde $\omega_{\mathbf{k}\sigma}(\pm)$ es dada por la expresión (2.7).

Siguiendo el formalismo de *Slave-boson*⁵⁶ se puede mostrar que el Hamiltoniano (2.1) puede ser escrito de forma no correlacionada (\mathcal{H}^u) como sigue:

$$\mathcal{H}^u = \sum_{\mathbf{k}\sigma} E_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\alpha} \tilde{\varepsilon}_f f_{\mathbf{k},\alpha}^{\dagger} f_{\mathbf{k},\alpha} + N_s \Lambda (R-1) + \sum_{\mathbf{k},\sigma\alpha} \left(\bar{V}_{\sigma\alpha} f_{\mathbf{k},\alpha}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\sigma} + \bar{V}_{\sigma\alpha}^* c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k},\alpha} \right), \quad (2.16)$$

de forma similar a como lo efectuó R. Franco *et al.* 2003⁷⁴ con

$$\bar{V}_{\sigma,\tau} = \sqrt{D_{\tau}} V_{\sigma,\tau}(\mathbf{k}). \quad (2.17)$$

El Hamiltoniano \mathcal{H}^u puede ser fácilmente diagonalizado siguiendo el trabajo de Tran *et al.* de 2012⁴⁷

$$\mathcal{H}_{dia}^u = \sum_{\mathbf{k}} \Psi^{\dagger}(\mathbf{k}) \mathcal{H}^u \Psi(\mathbf{k}) + N \Lambda (R - 1), \quad (2.18)$$

con \mathcal{H}^u

$$\mathcal{H}^u = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}} & V\Phi_{\mathbf{k}} & 0 & 0 \\ V\Phi_{\mathbf{k}}^* & \tilde{\varepsilon}_f & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{\mathbf{k}} & -V\Phi_{\mathbf{k}} \\ 0 & 0 & -V\Phi_{\mathbf{k}}^* & \tilde{\varepsilon}_f \end{pmatrix}, \quad (2.19)$$

donde $\Psi^{\dagger}(\mathbf{k}) = (c_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} f_{\mathbf{k},-}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} f_{\mathbf{k},+}^{\dagger})$ es un espinor de Dirac de cuatro componentes, con $\varepsilon_{\mathbf{k}} = E_{\mathbf{k}} - \mu$, $\tilde{\varepsilon}_f = \tilde{E}_f + \Lambda - \mu$ y

$$\Phi_{\mathbf{k}} = 2 [\sin(\mathbf{k}_x) - i \sin(\mathbf{k}_y)]. \quad (2.20)$$

Expandiendo $\Phi_{\mathbf{k}}$ para valores pequeños de \mathbf{k}_x y \mathbf{k}_y , se obtiene el Hamiltoniano dado por la teoría de Dirac

$$\mathcal{H}_{Dirac}^u = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}} & 2V(\mathbf{k}_x - i\mathbf{k}_y) & 0 & 0 \\ 2V(\mathbf{k}_x + i\mathbf{k}_y) & \tilde{\varepsilon}_f & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{\mathbf{k}} & -2V(\mathbf{k}_x + i\mathbf{k}_y) \\ 0 & 0 & -2V(\mathbf{k}_x - i\mathbf{k}_y) & \tilde{\varepsilon}_f \end{pmatrix}, \quad (2.21)$$

el espectro se puede escribir en forma de Dirac $E_{\pm}(p) = \varepsilon \pm \sqrt{(4V)^2(p_x^2 + p_y^2) + M^2}$, con $\varepsilon = (\varepsilon_{\mathbf{k}} + \tilde{\varepsilon}_f)/2$ y $M = (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \tilde{\varepsilon}_f)/2$. Esto demuestra que el tratamiento de *X-boson* captura el comportamiento de los conos de Dirac en la densidad espectral alrededor de $\mathbf{k} \approx 0$ como se indica en la figura 2.5.

2.1. Resultados

En las figuras 2.4 se calculan los números de ocupación en las aproximaciones *Slave-boson* y *X-boson* respectivamente, en función del potencial químico μ escogiendo el siguiente conjunto de parámetros de acuerdo a los resultados de las simulaciones donde se producen los cambios importantes que capturan el efecto de aislante topológico: $E_{f\alpha} = -1,0t$, $V = 0,8t$ y $T = 0,001t$. En ambos métodos se muestra una transición de primer orden en los números de ocupación para el régimen del momento local magnético⁷⁵. Sin embargo en el *Slave-boson* la transición es no física, porque ocurre para valores de $n_f > 1$ mientras que para el *X-boson* ocurre para $n_f < 1$. En la figura 2.4 (Izq.) esta “falsa” transición distorsiona todos los números de ocupación en la región de valencia intermediaria, indicando que el *slave-boson* no describe adecuadamente la región donde se presenta el aislante Kondo topológico. Esta transición de primer orden no se presenta cuando se considera la hibridización constante (V) como se muestra en los resultados del trabajo de R. Franco *et al.* (2003) (Figura 12)⁷⁴.

La transición de primer orden se puede asociar a la estructura de multiplete con $J = 5/2$ en la matriz de hibridización empleada para describir los iones de *Ce*, los cuales introducen una dependencia con \mathbf{k} otorgándole un carácter de estructura orbital no trivial en la hibridización.

En la Figura 2.5 (Izq.) se presenta la estructura de bandas de partícula simple por el tratamiento *X-boson* para $E_f = -3,15t$, $V = 0,8t$ $T = 0,001t$, a lo largo del eje x , $k = k_x$ y diferentes valores de k_y con potencial químico $\mu = 0,0$ en el régimen de valencia intermediaria (*VI*) correspondiente a un comportamiento aislante. En esta figura representa un aislante

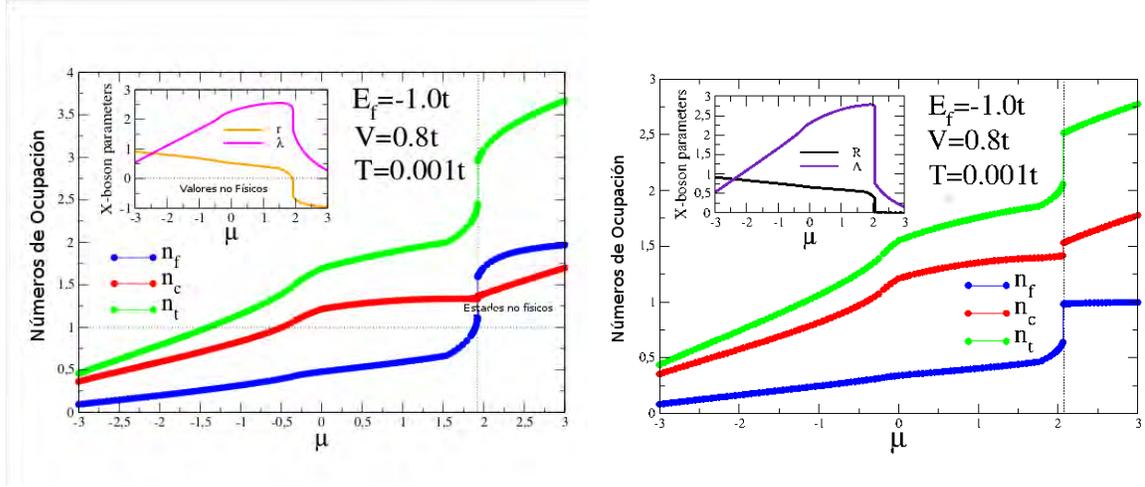


Figura 2.4.: (Izq.) Números de ocupación en la aproximación de *slave-boson*. (Der.) Números de ocupación en la aproximación de *X-boson*

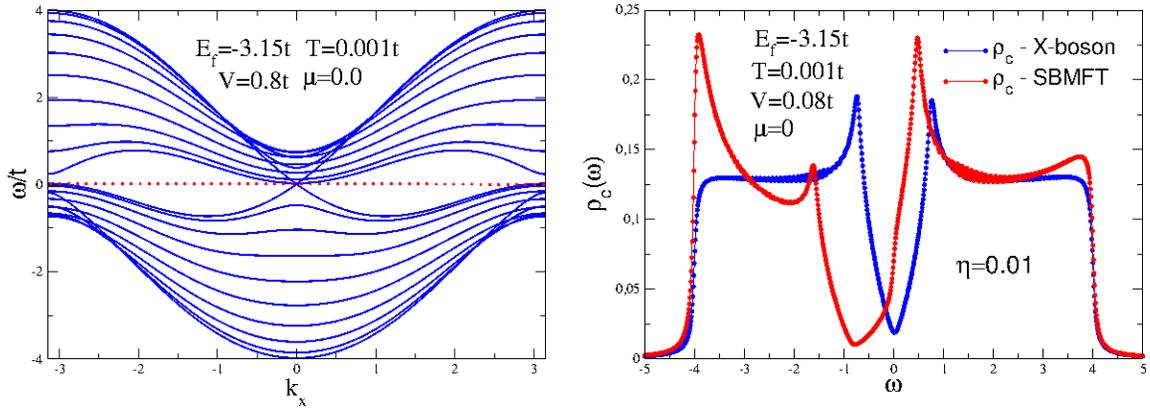


Figura 2.5.: (Izq.) Relación de dispersión de partícula simple para el tratamiento de *X-boson* usando los parámetros de la densidad de estados X-boson. (Der.) Densidad de estados de los *c-electrons* para el tratamiento de *X-boson* y *slave-boson*.

Kondo topológico fuerte, debido al pequeño *gap* en la relación de dispersión y el cono de Dirac que cruza por el potencial químico $\mu = 0,0T$ en medio del *gap*^{9,44}.

En la figura 2.5 (Der.), se presenta la densidad de estados de los electrones de conducción para los tratamientos de *Slave-boson* (curva roja) y *X-boson* (curva azul), calculados con los mismos parámetros de la figura 2.5 (Izq.). En el *X-boson* se presenta un resultado típico de aislante, con número de ocupación para los estados localizados $n_f = 0,66$ mientras

que el *Slave-boson* produce una transición no física en esta región con número de ocupación $n_f = 1,37$. La densidad de estados obtenida empleando el método *X-boson* presenta un pseudo-*gap* (depresión en la densidad de estados en el potencial químico) propia de los aislantes Kondo⁴³, con la forma característica *V-shape* originada por la presencia de la correlación *spin-orbita*⁷⁶, el valor de la parte imaginaria en la frecuencia empleado para el cálculo numérico fue $\eta = 0,01t$, por lo cual el resultado en la densidad de estados tiene un valor finito, como consecuencia de la dificultad numérica del programa inicial. Sin embargo, como se verá más adelante esta dificultad es superada mejorando la convergencia y los resultados para la densidad de estados.

3. Interacción de corto alcance entre estados localizados en un Aislante Kondo Topológico

Siguiendo el formalismo de *X-boson* para una red cuadrada en 2D del capítulo 2, se adiciona la interacción asociada a las correlaciones antiferromagnéticas (AFM) entre estados f a primeros vecinos (*short range antiferromagnetic correlation*, por sus siglas en ingles nos referiremos como SRAFC). Para algunos compuestos como YbB_{12} ⁷⁷, SmB_6 ⁷⁸ y $CeNiSn$ ⁷⁹, resultados experimentales obtenidos por dispersión inelástica de neutrones (*INS: Inelastic Neutron Scattering*), sugieren la existencia de correlaciones AFM entre estados localizados en el sistema. Típicamente, el espectro obtenido por *INS* exhibe un pico como respuesta en el intervalo $1 - 20meV$ a bajas temperaturas, que a su vez está relacionado con la estructura a bajas energías del *gap* de espín (*spin-gap*), que desaparece conforme aumenta la temperatura. Las correlaciones AFM de corto alcance llevan a la formación de la estructura *spin - gap* alrededor de $\hbar\omega = 10meV$ para el YbB_{12} , $\hbar\omega = 14,5meV$ para el SmB_6 , de $\hbar\omega = 2meV$ y $\hbar\omega = 4meV$, para el $CeNiSn$ en direcciones diferentes⁷⁹.

Una dispersión magnética colectiva observada por Alekseev y colaboradores⁷⁸ y propuesta con anterioridad por Kikoin y Mishchenko⁸⁰ para explicar el origen de la resonancia inelástica en $14meV$ obtenida por dispersión inelástica de neutrones para el SmB_6 ⁷⁸. Su teoría no solo da el valor de la resonancia sino también explica la inusual dependencia angular de la intensidad de la dispersión inelástica explicada a partir de dispersión de excitaciones magnéticas que concuerdan con los resultados experimentales. Sin embargo, la fuente de dichas excitaciones en el SmB_6 no han sido aclaradas hasta el momento y merecen mayor investigación. En este capítulo no se busca esclarecer el origen de estas fluctuaciones, únicamente se asume el acoplamiento de los electrones localizados entre sus vecinos más cercanos por medio de una interacción de intercambio tipo Heisenberg.

Otra pieza clave de la evidencia de las correlaciones SRAFC en algunos aislantes Kondo es provista por experimentos de alta presión⁸¹. Medidas de resistividad en el SmB_6 presentadas por Derr *et al.*⁸² en óptimas condiciones hidrostáticas, empleando un yunque de diamante en

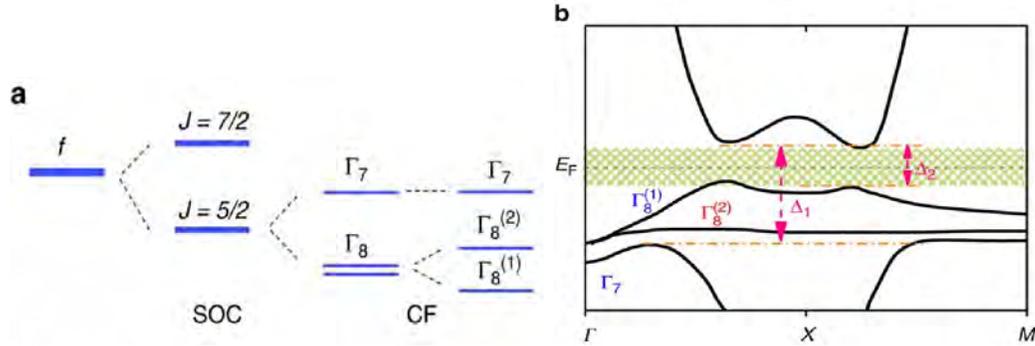


Figura 3.1.: (a) Evolución de niveles de energía para los estados f en el SmB_6 , los cuales siguen los trabajos de Baruselli *et al.* (2014) y Kang *et al.* (2015)^{7, 8}. Los estados f se dividen en $J = 7/2$ y $J = 5/2$ por el acoplamiento espín-órbita. el estado $J = 5/2$, que se encuentra ligeramente por debajo del nivel de Fermi E_F , se divide en los cuartetos Γ_7 y Γ_8 por el efecto de campo cristalino (CF). En medio del camino $\Gamma-X$, el multiplete Γ_8 se divide en los dobletes $\Gamma_8^{(1)}$ y $\Gamma_8^{(2)}$. (b) Esquema del diagrama de bandas para SmB_6 en base a los cálculos obtenidos en las referencias^{1,9,10,11}. La hibridización Kondo entre las bandas Γ_7 y $\Gamma_8^{(1)}$ y la banda de conducción abren dos *gaps* los cuales son denotados por Δ_1 y Δ_2 . Tomado de L. Jiao *et al.* (2016)¹².

un ambiente de argón como medio de presión, mostraron que el estado aislante desaparece debido al colapso del *gap* topológico, en una presión alrededor de los $P = 10GPa$, donde un orden magnético homogéneo de corto alcance aparece. La temperatura T_M de este orden magnético corresponde al mínimo de la resistividad ρ y puede pertenecer al estado base antiferromagnético con un efecto de reconstrucción de límites de la región antiferromagnética que también pueden ser obtenidos del diagrama de fases del sistema. En un artículo reciente⁸³, medidas dependientes de la presión para el SmB_6 indican que el material mantiene un carácter de valencia intermedia estable hasta una presión de al menos $35GPa$ y el cierre del *gap* resistivo y el inicio del orden magnético en $P = 10GPa$ no son llevados a cabo por estabilización de un valor entero de valencia. Esto es un resultado inesperado para indicar que el compuesto está soportado por una estructura no trivial.

En el caso del SmB_6 , la interacción espín-órbita da lugar a la degeneración de los multipletes, dividiéndolo dos niveles: el primero, corresponde al estado base con $J = 5/2$ y el segundo al estado excitado con $J = 7/2$. Generalmente el estado $J = 7/2$ no es considerado, ni ningún estado del boro (B_6). En cálculos *ab initio*¹¹ se indica que estos estados están lejos del nivel de Fermi y no intervienen de manera fuerte en las propiedades relevantes del material. Si se considera el estado base $J = 5/2$, las correcciones de campo cristalino debido a los iones del Samario dividen este estado de acuerdo con la representación irreducible del grupo de simetría

cúbico O_h en dos estados degenerados: $\Gamma_8(4)$ (estado base) y $\Gamma_7(2)$ (estado excitado), donde el número en paréntesis equivale a la degenerancia del nivel. Los estados Γ_8 del cuarteto tienen lóbulos a lo largo de la dirección axial: $\Gamma_8^{(1)}$ a lo largo de los ejes x y y y $\Gamma_8^{(2)}$ a lo largo del eje z ⁸.

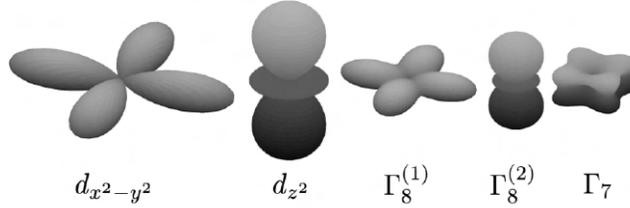


Figura 3.2.: Forma de los orbitales obtenidos del modelo multi-orbital de Anderson empleando la versión generalizada del modelo de *tight-binding* que clasifica una degeneración por espín de los niveles d ($d_{x^2-y^2}$ y d_{z^2}) y los multipletes $\Gamma_8^{(1)}$, $\Gamma_8^{(2)}$ y Γ_7 generados por el campo cristalino y la interacción espín-órbita $J = 5/2$. La hibridización en 2D es posible entre los orbitales con la misma simetría $\Gamma_8^{(1)}$ Γ_7 con $d_{x^2} - d_{y^2}$. Tomado de Baruselli *et al.* (2014)⁷.

En recientes artículos experimentales¹² investigaron la naturaleza de los *in-gap states* del AKT SmB_6 , empleando microscopía/espectroscopía de barrido electrónico (STM/STS). Las medidas fueron presentadas en una base de temperatura de $0,35K$ con una resolución de energía alrededor de $0,5meV$, con el fin de medir estados dentro del *gap* de hibridización alrededor de $\pm 20meV$. Debido al fuerte acoplamiento espín-órbita y los efectos de campo cristalino, únicamente las bandas Γ_7 y Γ_8^1 son permitidas para hibridizar con la banda de conducción d del Sm vía efecto Kondo¹², y dos *gaps* de hibridización etiquetados con Δ_1 y Δ_2 asociados con las representaciones Γ_7 y $\Gamma_8^{(1)}$, respectivamente (ver figura 3.1), estos *gaps* abren con diferente valor de energía. Los autores muestran que Δ_2 reside en el amplio *gap* Δ_1 y contribuye considerablemente con los estados *in-gap*. Considerando los resultados experimentales mencionados y por simplicidad, en este capítulo se usa la representación $\Gamma_8^{(1)}$ como principal ingrediente del proceso de hibridización en nuestros cálculos.

Aquí se resuelve el problema de una red cuadrada 2D usando la representación irreducible $\Gamma_8^{(1)}$ la cual reproduce la densidad de estados *V-shaped* en el régimen AKT y un doblete de Kramer cuyo factor de forma puede expresarse como una matriz 2×2 . Este factor representa la hibridización entre electrones de conducción caracterizados por la etiqueta σ y los electrones localizados caracterizados por la etiqueta $\alpha = \pm$. Es importante tener en cuenta que el formalismo desarrollado en este aparte es suficientemente general para ser aplicado como un “modelo mínimo” definido por DZero *et al.*^{46,84} para describir la física a baja temperatura del SmB_6 en el cual el cuarteto Γ_8 hibridiza con el cuarteto e_g (dobletes de Kramer más los estados degenerados por espín).

DZero *et al.*^{46,84} estudian los aislantes Kondo topológicos empleando la teoría de campo medio de *slave boson* (SBMFT)⁸⁵, en el límite de repulsión de Coulomb infinita ($U \rightarrow \infty$)^{9,47}. Sin embargo, la descripción usando SBMFT resulta no ser adecuada para describir sistemas de valencia intermedia como el AKT SmB_6 , debido a la presencia de una transición de segundo orden no física en temperatura, donde los electrones de conducción y electrones localizados se encuentran desacoplados entre ellos. Para solventar este problema y mantener la simplicidad del tratamiento generalizamos el trabajo previo (cap. 2) en la aproximación de *X-boson* para la red periódica de Anderson considerando los electrones localizados con momentum angular azimutal total J y componente de proyección de momentum angular M en dirección z , mientras los electrones de conducción son descritos por momentum \mathbf{k} y espín σ .

En la aproximación *X-boson* para el modelo de Anderson en el límite de repulsión de Coulomb infinita, en términos de los operadores de Hubbard de forma análoga al capítulo 2 el hamiltoniano es descrito por

$$H = H_c + H_f^o + H_h + H_f \quad (3.1)$$

$$H_c = \sum_{\mathbf{k}\sigma} E_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} \quad (3.2)$$

corresponde al Hamiltoniano de los electrones de conducción (*c-electrons*), con momentum \vec{k} y espín σ ,

$$H_f^o = \sum_{j\alpha} E_{f,\alpha} X_{j,\alpha\alpha}, \quad (3.3)$$

corresponde a la energía de los electrones localizados (*f-electrons*) independientes, con pseudo-espín α que pertenecen a una representación Γ de algún estado multiplete en el sitio j .

$$H_h = \sum_{j\alpha, \mathbf{k}\sigma} \left(V_{\sigma\alpha}(\mathbf{k}) X_{j,\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} + V_{\sigma\alpha}^*(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger X_{j,\alpha} \right), \quad (3.4)$$

es el término de hibridación del Hamiltoniano que tiene en cuenta la interacción entre los electrones c y f .

Para tener en cuenta las correlaciones magnéticas de corto alcance entre los primeros vecinos de los *f-electrons* de la red, se incluye el término tipo Heisemberg

$$H_f = -J_H \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (3.5)$$

donde J_H es la integral de intercambio y $\mathbf{S}_{i,j}$ son los momentos magnéticos de los sitios i y j de la red. Cuando $J_H < 0$ ($J_H > 0$) las correlaciones magnéticas favorecen el antiferromagnetismo (ferromagnetismo). Expresando el Hamiltoniano de Heisemberg en términos de

operadores de Hubbard y realizando una aproximación de campo medio (como se muestra en el apéndice E) este puede ser escrito como

$$H_f = \sum_{i,j,\alpha} t_{i,j,\alpha} X_{i,\alpha}^\dagger X_{j,\alpha}, \quad (3.6)$$

donde

$$t_{i,j,\alpha} = -\frac{1}{2} J_H \langle X_{i,\alpha}^\dagger X_{j,\alpha} \rangle, \quad (3.7)$$

representa el *hopping* asociado a la correlación antiferromagnética entre *f-electrons* a primeros vecinos, donde i y j corren sobre todos los sitios N_s y $t_{i,j,\alpha} = t_{j,i,\alpha}^*$ para satisfacer el carácter hermítico del Hamiltoniano. El *hopping* es proporcional a la función de correlación $\langle X_{i,\alpha}^\dagger X_{j,\alpha} \rangle$.

Los operadores X son convenientes para trabajar con los estados locales asociados a los sitios j de la red. De forma análoga como se hizo en el capítulo anterior, usando los operadores de Hubbard, el Hamiltoniano se puede escribir como

$$H_1 = H_h + H_f. \quad (3.8)$$

Cuando $U \rightarrow \infty$ la identidad I_j en el sitio j debe satisfacer la relación de completéz:

$$X_{j,00} + X_{j,(++)} + X_{j,(--)} = I_j, \quad (3.9)$$

donde $\alpha = \pm$ son las componentes de pseudoespín asociadas a los dobletes de Kramer. Los números de ocupación $n_{j,\alpha} = \langle X_{j,\alpha\alpha} \rangle$ pueden ser calculados a partir de las funciones de Green asociadas, asumiendo invariancia traslacional podemos escribir $n_{j,\alpha} = n_\alpha$ (independiente de j), así que se puede escribir

$$n_o + n_+ + n_- = 1. \quad (3.10)$$

De forma similar a la aproximación SBMFT⁵⁶, la aproximación de *X-boson* consiste en sumar el producto de cada ec. (3.9) a un multiplicador de Lagrange Λ_j a la ec. (3.1), el nuevo Hamiltoniano genera el funcional que se minimizará empleando el método de Lagrange. Para ello se introduce el parámetro

$$R \equiv \langle X_{j,oo} \rangle, \quad (3.11)$$

imponiendo la relación de completéz 3.9 a el Hamiltoniano dado por la ec. 3.1 e introduciendo el parámetro de Lagrange $\Lambda_j = \Lambda$, se obtiene un nuevo Hamiltoniano con la misma forma de la ec. (3.1)

$$\begin{aligned} H = & \sum_{\mathbf{k}\sigma} E_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{j\alpha} E_{f,\alpha} X_{j,\alpha\alpha} + \sum_{j\alpha,\mathbf{k}\sigma} \left(V_{\sigma\alpha}(\mathbf{k}) X_{j,\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} + V_{\sigma\alpha}^*(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger X_{j,\alpha} \right) \\ & + \sum_{i,j,\alpha} t_{i,j} X_{i,\alpha}^\dagger X_{j,\alpha} + N_s \Lambda (R - 1), \end{aligned} \quad (3.12)$$

pero con una energía localizada renormalizada

$$\tilde{E}_{f,\alpha} = E_{f,\alpha} + \Lambda. \quad (3.13)$$

El procedimiento permite una variación independiente de R cuando el potencial termodinámico dado por la ecuación

$$\Omega = \bar{\Omega}_0 + \left(\frac{-1}{\beta}\right) \sum_{\mathbf{k}\sigma\alpha, \ell=\pm} \ln [1 + \exp(-\beta \omega_{\mathbf{k}\sigma\alpha}(\ell))], \quad (3.14)$$

es minimizado, siempre que la relación de completéz

$$R = 1 - \sum_{\alpha} \langle X_{\alpha\alpha} \rangle \quad (3.15)$$

se satisfaga simultáneamente.

Las funciones de Green resultantes son similares a las obtenidas a las ecuaciones 2.4, 2.5 y 2.6. Con $\tilde{E}_{f\alpha} = E_{f\alpha} + D_{\alpha} \bar{E}_{\mathbf{k}}$,

$$\bar{E}_{\mathbf{k}} = - \sum_l t_{i,i+l} \exp[\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{R}_l], \quad \mathbf{k}_i = \mathbf{k}_x, \mathbf{k}_y, \quad (3.16)$$

considerando independencia de espín en la banda de conducción, la energía $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ es calculada por *tight-binding* para una red cuadrada de igual forma como se calculó en el capítulo anterior en la ecuación 2.9, lo cual permite escribirla de la siguiente forma

$$\bar{E}_{\mathbf{k}\alpha} = -\frac{1}{2} J_H \langle X_{i\alpha}^{\dagger} X_{j\alpha} \rangle \varepsilon_{\mathbf{k}}, \quad (3.17)$$

con

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2t \sum_{i=x,y} [\cos(k_i a)] - \mu, \quad (3.18)$$

donde a es el parámetro de red. Aquí también se considera $t_x = t_y = t$ por simplicidad.

3.1. Potencial termodinámico para el X-boson

En esta sección se extiende el tratamiento de *X-boson* para el modelo con interacción entre estados localizados. Además se discute el potencial termodinámico

$$\Omega = -k_B T \ln(\mathcal{Q}) \quad (3.19)$$

donde \mathcal{Q} es la gran función de partición y k_B es la constante de Boltzman. Una forma conveniente para calcular Ω es empleando el método del parámetro de integración ξ ⁸⁶. En este método se introduce un parámetro de acoplamiento constante ($0 < \xi < 1$) del cual depende el Hamiltoniano $H(\xi) = H_o + \xi H_1$, donde H_1 es descrito por la ecuación (3.8). Por cada ξ existe un potencial termodinámico $\Omega(\xi)$ que satisface

$$\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \xi} \right)_{V_s, T, \mu} = \langle H_1(\xi) \rangle_\xi, \quad (3.20)$$

aquí $\langle A \rangle_\xi$ es el ensamble promedio del operador A , para un sistema con Hamiltoniano $H(\xi)$ y valores de potencial químico μ , temperatura T y volumen V_s . Integrando Ω

$$\Omega = \Omega_o + \int_0^1 d\xi \langle H(\xi) \rangle_\xi, \quad (3.21)$$

donde Ω_o es el potencial termodinámico para $\xi = 0$. Que a su vez corresponde al ensamble promedio del Hamiltoniano del sistema sin hibridización y sin *hopping* de electrones f . En ausencia de campo magnético y considerando $\tilde{\varepsilon}_{f,\alpha} = \tilde{\varepsilon}_f$ y $\varepsilon_{\mathbf{k},\sigma} = \varepsilon_{\mathbf{k}}$

$$\Omega_o = \left(\frac{-2}{\beta} \right) \sum_{\mathbf{k}} \ln [1 + e^{-\beta \varepsilon_{\mathbf{k}}}] + \left(\frac{-N_s}{\beta} \right) \ln [1 + 2e^{-\beta \tilde{\varepsilon}_f}] + N_s \Lambda(R - 1). \quad (3.22)$$

En este capítulo el sistema posee dos tipos de contribuciones a la perturbación: la hibridización H_f y el *hopping* H'_f entre los electrones f . Las contribuciones a la perturbación sin *hopping* al ensamble $\langle H(\xi) \rangle$ ya han sido calculadas previamente en la referencia R. Franco *et al.* 2002⁷⁴. Incluyendo la perturbación H'_f en H_1 y siguiendo la misma técnica empleada en la referencia citada se obtiene

$$\langle H_1 \rangle_\xi = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega n_F(\omega) \sum_{\mathbf{k}, \alpha \sigma} \text{Im} \left\{ \frac{\xi |\overline{V_{\sigma\alpha}(\mathbf{k})}|^2 - \overline{E_{\mathbf{k}\alpha}^s}(\omega^+ - \varepsilon_{\mathbf{k}})}{(\omega^+ - \varepsilon_f - \xi \overline{E_{\mathbf{k}\alpha}^s})(\omega^+ - \varepsilon_{\mathbf{k}}) - \xi^2 |\overline{V_{\sigma\alpha}(\mathbf{k})}|^2} \right\}, \quad (3.23)$$

donde $n_F(x) = 1/[1 + e^{\beta x}]$ es la función de distribución de Fermi-Dirac y $\omega^+ = \omega + i\eta$.

Como en el caso del sistema $H'_f = 0$, Eq. (3.23) tenemos una interesante propiedad de escala: la ecuación obtenida es igual a la expresión válida para el sistema sin correlación con parámetros renormalizados $\overline{V_{\sigma\alpha}(\mathbf{k})}$ y $\overline{E_{\mathbf{k}\alpha}^s}$ (recordemos que reemplazando $D_\alpha = 1$ en las funciones de Green 2.4-2.6, se obtiene la FG sin correlación). En vez de presentar las integraciones sobre ξ y ω , se usa el resultado de Ω^u del sistema sin correlación con $\overline{V_{\sigma\alpha}(\mathbf{k})} = \sqrt{D_\alpha} V_{\sigma\alpha}(\mathbf{k})$ y $\overline{E_{\mathbf{k}\alpha}^s} = \overline{E_{\mathbf{k}\alpha}} D_\alpha$, entonces se emplea la ecuación (3.21) para calcular $\int_0^1 d\xi \langle H_1^u(\xi) \rangle_\xi = \Omega^u - \Omega_o^u$,

$$\Omega_o^u = \left(\frac{-2}{\beta} \right) \sum_{\mathbf{k}} \ln [1 + e^{-\beta \varepsilon_{\mathbf{k}}}] + \left(\frac{-2}{\beta} \right) \sum_{\mathbf{k}} \ln [1 + e^{-\beta \tilde{\varepsilon}_f}] + N_s \Lambda(R - 1), \quad (3.24)$$

que equivale a Ω^u para $\bar{V}_{j,\mathbf{k},\sigma} = \overline{E_{\mathbf{k}\alpha}} = 0$. Para el caso del Hamiltoniano para la red sin perturbar

$$H^u = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\alpha} \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}^f f_{\mathbf{k},\alpha}^\dagger f_{\mathbf{k},\alpha} + \sum_{\mathbf{k}\sigma,\alpha} \left(\bar{V}_{\sigma\alpha}(\mathbf{k}) f_{\mathbf{k},\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} + \bar{V}_{\sigma\alpha}^*(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k},\alpha} \right) + N_s \Lambda (R - 1), \quad (3.25)$$

donde

$$\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}^f = \tilde{\varepsilon}_{f,\alpha} + D_\alpha \overline{E_{k\alpha}}, \quad (3.26)$$

$$\tilde{\varepsilon}_{f,\alpha} = E_{f,\alpha}^o + \Lambda - \mu \quad (3.27)$$

con $\overline{E_{k\alpha}}$ dado por las ecuaciones (3.17 y 3.18).

El Hamiltoniano puede ser diagonalizado y el correspondiente \mathcal{H}^u se escribe como

$$\mathcal{H}^u = \sum_{\mathbf{k}\sigma,\alpha} \omega_{\mathbf{k}\sigma,\alpha} v_{\mathbf{k}\sigma,\alpha}^\dagger v_{\mathbf{k}\sigma,\alpha} + N_s \Lambda (R - 1), \quad (3.28)$$

donde $v_{\mathbf{k}\sigma,\alpha}^\dagger$ ($v_{\mathbf{k}\sigma,\alpha}$) son los operadores creación (destrucción) compuestas por partículas de energías $\omega_{\mathbf{k}\sigma,\alpha}$.

El cálculo de

$$\Omega^u = \left(\frac{-1}{\beta} \right) \sum_{\mathbf{k}\sigma,\alpha} \ln [1 + \exp(-\beta \omega_{\mathbf{k}\sigma,\alpha})] + N_s \Lambda (R - 1), \quad (3.29)$$

se realiza de la misma forma y los valores de $\omega_{\mathbf{k}\sigma,\alpha}$ en \mathcal{H}^u son dados por los polos de la FG en las ecuaciones de campo medio (2.4,2.5, 2.6). Debido a la conservación de \mathbf{k} , el Hamiltoniano se reduce a N_s matrices 2×2 por cada componente de espín σ , donde N_s es el número de sitios y $\omega_{\mathbf{k}\sigma,\alpha}$ puede ser calculado analíticamente

$$\omega_{\mathbf{k}\sigma,\alpha}^\pm = \frac{1}{2} \left(\varepsilon_{\mathbf{k},\sigma} + \varepsilon_{k,\alpha}^f \right) \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(\varepsilon_{\mathbf{k},\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}^f \right)^2 + 4|V|^2 D_\alpha \Delta^2(\mathbf{k})}. \quad (3.30)$$

Finalmente, empleando las ecuaciones (3.21,3.22,3.24,3.29) se encuentra el valor de

$$\Omega = \bar{\Omega}_0 + N_s \Lambda (R - 1) + \left(\frac{-1}{\beta} \right) \sum_{\mathbf{k}\sigma,\alpha,\ell=\pm} \ln [1 + \exp(-\beta \omega_{\mathbf{k}\sigma,\alpha}(\ell))], \quad (3.31)$$

donde

$$\bar{\Omega}_0 \equiv \Omega_o - \Omega_o^u = \left(-\frac{N_s}{\beta} \right) \ln \left[\frac{1 + 2 \exp(-\beta \varepsilon_f)}{(1 + \exp(-\beta \varepsilon_f))^2} \right]. \quad (3.32)$$

La dependencia de la hibridización con \mathbf{k} tiene la misma forma descrita en el capítulo anterior y siguiendo la derivación en⁴⁷, el factor de forma se escribe como se presenta en⁴⁸ $\Phi(\mathbf{k}) =$

$\mathbf{d}(\mathbf{k}) \circ \sigma$, con las matrices de Pauli σ . Para la representación irreducible bi-dimensional $\Gamma_8^{(1)}$, $\mathbf{d}(\mathbf{k}) = 2[\sin(k_x), \sin(k_y)]$, el término que depende de la hibridación se escribe como

$$\Delta^2(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \text{Tr}[\Phi(\mathbf{k}) \cdot \Phi^*(\mathbf{k})] = 4[\sin^2(k_x) + \sin^2(k_y)]. \quad (3.33)$$

El Hamiltoniano 3.25 de manera análoga al Hamiltoniano 2.18 del caso sin interacción entre electrones f se puede escribir como

$$\mathcal{H}^u = \sum_{\mathbf{k}} \Psi^\dagger(\mathbf{k}) H^u(\mathbf{k}) \Psi(\mathbf{k}) + N_s \Lambda (R - 1), \quad (3.34)$$

expandiendo $\Phi(\mathbf{k})$ para valores pequeños de \mathbf{k}_x y \mathbf{k}_y se obtiene el Hamiltoniano

$$H^u(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}} & V^- & 0 & 0 \\ V^+ & \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}^f & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{\mathbf{k}} & -V^+ \\ 0 & 0 & -V^- & \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}^f \end{pmatrix}, \quad (3.35)$$

donde $V^+ = 2V(\mathbf{k}_x + i\mathbf{k}_y)$ y $V^- = 2V(\mathbf{k}_x - i\mathbf{k}_y)$ cuyo espectro puede ser reescrito como una ecuación de Dirac para la energía

$$E_{\pm}(p) = \varepsilon \pm \sqrt{A^2(p_x^2 + p_y^2) + M^2} \quad (3.36)$$

con $\varepsilon = (\varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}^f)/2$, $M = (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}^f)/2$ y $A = 4V$ como se muestra en la figura 2.5 (Izq.). Las correlaciones aparecen en la aproximación *X-boson* a través de la renormalización de la energía de los electrones f ($\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}^f$) y la cantidad $D_\alpha = R + n_{f\alpha}$, con $R = \langle X_{0,0} \rangle$ y $n_{f\alpha} = \langle X_{\alpha\alpha} \rangle$. Como se calculó en el capítulo anterior D_α debe ser obtenido auto consistentemente minimizando el correspondiente potencial termodinámico, respecto al parámetro R y el resultado de Λ , que para este caso viene dado por

$$\Lambda = \frac{-1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x dk_y \times \left\{ \bar{E}_{\mathbf{k}\alpha} \left[n_F(\omega_{\mathbf{k}}^{(+)}) + n_F(\omega_{\mathbf{k}}^{(-)}) \right] + \frac{\left[2V^2 \Delta^2(\mathbf{k}) + \bar{E}_{\mathbf{k}\alpha} (\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}^f - \varepsilon_{\mathbf{k},\sigma}) \right] \left[n_F(\omega_{\mathbf{k}}^{(+)}) - n_F(\omega_{\mathbf{k}}^{(-)}) \right]}{\sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}^f)^2 + 4V^2 D_\alpha \Delta^2(\mathbf{k})}} \right\}. \quad (3.37)$$

Con el cálculo numérico de Λ se obtienen los números de ocupación tanto para los electrones f (n_f) como para los electrones c (n_c) empleando las FG (2.4)-(2.6)

$$n_{f,c} = \left(\frac{-1}{\pi} \right) \text{Im} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega n_F(\omega) \left(\frac{1}{4\pi^2} \right) \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x dk_y G_{\mathbf{k}\sigma,\alpha}^{f,c}(\omega). \quad (3.38)$$

Por medio de la ecuación anterior se obtiene el número de ocupación total de partículas $N_t = 2(n_f + n_c)$, el cual se mantiene constante para todo el proceso auto consistente, mientras el potencial químico (μ) varía libremente hasta obtener la convergencia de la función de correlación antiferromagnética de corto alcance (SRAFC, por sus siglas en ingles *short range antiferromagnetic coupling*) $\langle X_{i\alpha}^\dagger X_{j\alpha} \rangle$ y se obtienen los parámetros *X-boson* Λ y R del sistema.

La densidad de estados se calcula de forma análoga al caso sin interacción entre estados localizados ecuación 2.15.

La correlación entre estados localizados se calcula teniendo en cuenta la FG de los vecinos más cercanos entre los sitios f

$$G_{\mathbf{k}\sigma,\alpha}^{ij}(z_n) = \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}\sigma,\alpha}^{ff}(z_n) e^{i\mathbf{k}\cdot(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \quad (3.39)$$

considerando el desarrollo por *tight-binding* de la red cuadrada el SRAFC puede ser escrito como

$$\langle X_{i\alpha}^\dagger X_{j\alpha} \rangle = \left(\frac{-1}{\pi} \right) \text{Im} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega n_F(\omega) \left(\frac{1}{4\pi^2} \right) \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x dk_y e^{i(k_x + k_y)a} G_{\mathbf{k}\sigma,\alpha}^{ff}(\omega). \quad (3.40)$$

Las correlaciones Kondo se calculan de la misma manera

$$\langle X_{i\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle = \left(\frac{-1}{\pi} \right) \text{Im} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega n_F(\omega) \left(\frac{1}{4\pi^2} \right) \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x dk_y G_{\mathbf{k}\sigma,\alpha}^{fc}(\omega), \quad (3.41)$$

donde $G_{\mathbf{k}\sigma,\alpha}^{ff}(z_n)$ es la FG localizada y $G_{\mathbf{k}\sigma,\alpha}^{fc}(z_n)$ es la FG cruzada, dadas por las ecuaciones 2.4 y 2.6.

3.2. Resultados

Para todos los cálculos, el valor constante de la hibridización se tomó como $V = 0,5t$ y se considera el número total de partículas constante. En el caso de *slave-boson* $N_t = 2,0$, lo cual conlleva a un estado de medio llenado, produciendo un estado aislante independiente del valor de E_f . En la aproximación *X-boson* se emplea $N_t = 1,666$, similar al caso de medio llenado en el límite de correlación infinita. N_t es constante porque la fuerte correlación contrae el área

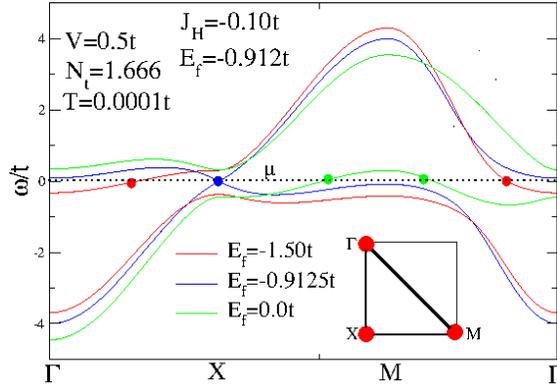


Figura 3.3.: Bandas de energía en la aproximación *X-boson*. Los cálculos fueron obtenidos en los puntos de alta simetría de la zona de Brillouin $\Gamma \rightarrow X \rightarrow M \rightarrow \Gamma$.

de la banda f y dependiendo de la energía E_f , el sistema puede exhibir una fase metálica o aislante Kondo topológica. Los parámetros usados se encuentran presentes en cada figura.

En la figura 3.3 se representa el diagrama de bandas de energía para diferentes valores de energía del estado localizado (E_f), siguiendo la ecuación 5.11: $E_f = 0,0t$ en la región de ocupación baja, $E_f = -0,912t$ en el punto crítico donde la condición para el desarrollo del AKT y $E_f = -1,5t$ en la región Kondo. Los cálculos se obtuvieron en los puntos de alta simetría en la zona de Brillouin $\Gamma \rightarrow X \rightarrow M \rightarrow \Gamma$. En el *inset* se muestra el camino del cálculo de diagrama de bandas, el cual presenta el cierre del *gap* en el punto de simetría X . La presencia de correlaciones cambia el comportamiento de los resultados para la estructura de bandas del sistema sin correlaciones⁸⁷ o los resultados que se obtienen con el tratamiento de *slave-boson*^{9,44}, donde la transición topológica ocurre entre estados aislantes. Aquí la transición ocurre entre estados metálicos, representado por energías $E_f = 0,0t$ y $E_f = -1,5t$, el potencial químico atraviesa los estados de banda dos veces, lo cual indica una fase topológicamente trivial metálica y una fase aislante topológicamente no trivial, la cual define el estado AKT, mostrando una inversión de la banda en donde el potencial químico cruza los estados de banda una sola vez. Esta situación es representada en el diagrama de fase de la figura 3.7.

3.2.1. Estudio de la densidad de estados

En la figura 3.4 se representa la densidad de estados $\rho_{f,c}$ sin considerar *SRAFC* ($J_H = 0,0$). Pero con la dependencia en \mathbf{k} como se describe en la ecuación 3.33, caracterizada por la representación $\Gamma_8^{(1)}$ que conlleva a abrir el *gap* en forma de V en la hibridización de los electrones de conducción, como se muestra en el *inset* de la figura 3.4.

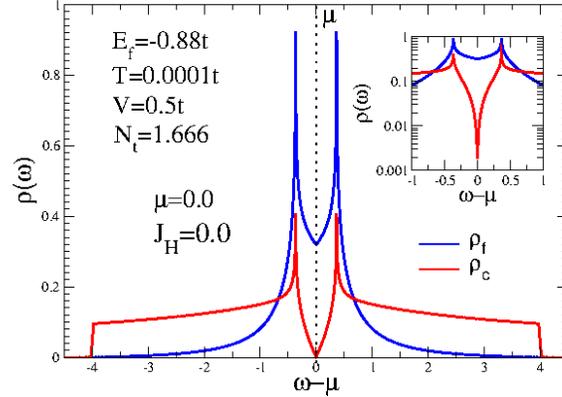


Figura 3.4.: Densidad de estados de los electrones localizados (ρ_f) y de conducción (ρ_c) con $J_H = 0,0$ por el método *X-boson*. En el *inset* se representa la densidad de estados en escala logarítmica que evidencia el carácter *V-shape* del *gap* de conducción Kondo topológico.

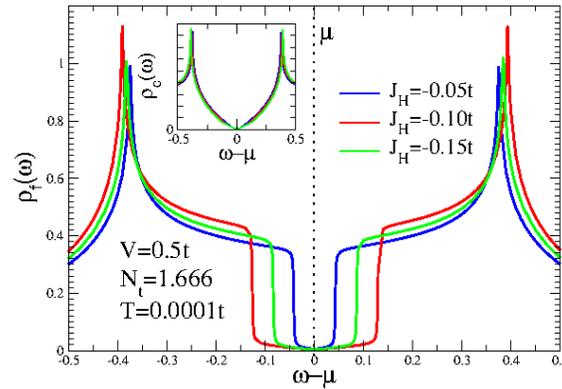


Figura 3.5.: Densidad de estados para los electrones localizados y de conducción por el método *X-boson* considerando diferentes valores de J_H y E_f .

El efecto de *SRAFC* ($J_H < 0$) en la densidad de estados de los electrones localizados y electrones de conducción (*inset*), como se muestra en la figura 3.5, ensancha el *gap* alrededor del potencial químico $\omega - \mu$ a medida que J_H se hace más negativo, es decir el acoplamiento antiferromagnético se hace más fuerte. Los valores usados para J_H y E_f son: $J_H = -0,05t$ con $E_f = -0,896t$, $J_H = -0,10t$ con $E_f = -0,912t$ y $J_H = -0,15t$ con $E_f = -0,93t$. Además, incrementa el pico en los bordes (alrededor de $\pm 0,4t$) fortaleciendo el efecto Kondo y el acoplamiento antiferromagnético al mismo tiempo.

En la figura 3.6 debido a la existencia de *SRAFC* las densidades de estado ρ_f y ρ_c abren un *gap* en forma de *V* en el potencial químico para una energía de $E_f = -0,912t$ (compare

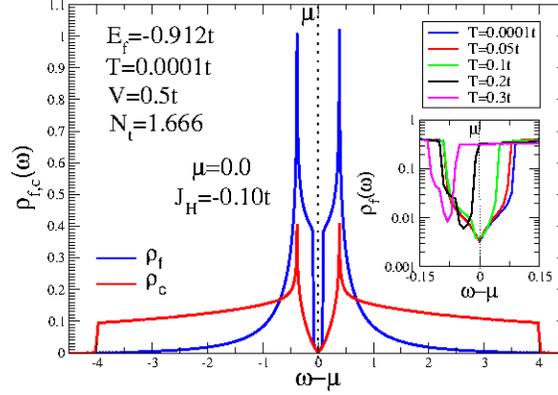


Figura 3.6.: Densidad de estados para los electrones localizados y de conducción para el método *X-boson* para una temperatura $T = 0,0001t$, $J_H = -0,10t$. En el *inset* se representa la densidad de estados en escala logarítmica para diferentes valores de temperaturas.

las figuras 3.4 y 3.6). En el *inset* se muestra el comportamiento de la densidad de estados ρ_f con la temperatura. Entre las temperaturas $T = 0,0001t$ y $T = 0,01t$ la forma en V se mantiene, mientras que para temperaturas entre $T = 0,05t$ y $T = 0,5t$ por efectos térmicos, la densidad presenta un desplazamiento a la izquierda y el ancho se reduce. En $T = 0,2t$ la densidad ρ_f cruza el potencial químico y el sistema sufre una transición de aislante a metal como ocurre en un aislante Kondo real.

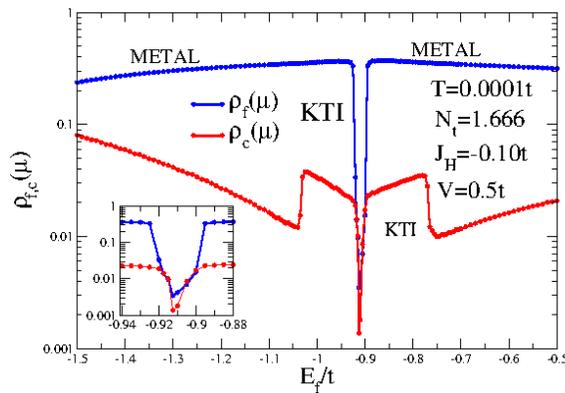


Figura 3.7.: Densidad de estados de los electrones localizados $\rho_f(\mu)$ y electrones de conducción $\rho_c(\mu)$ por la aproximación *X-boson* evaluadas en el potencial químico μ , como función de la energía del nivel localizado E_f . Las letras mayúsculas en la figura representan: la región metálica (Metal) y la región de aislante topológico (AKT o sus siglas en inglés KTI).

El diagrama de fase puede mostrarse de otra forma graficando las densidades de estados calculadas en el potencial químico $\rho_{f,c}(\mu)$ en función de la energía del estado localizado (E_f), como se muestra en la gráfica 3.7. El sistema presenta un comportamiento metálico para todos los valores de E_f excepto para la región comprendida entre $-0,925t \lesssim E_f \lesssim -0,895t$, donde el sistema se comporta como un AKT. Es necesario mencionar que siempre se puede obtener un *gap* en la densidad de estados para cualquier valor E_f , sin embargo el potencial químico es ubicado dentro del *gap* produciendo un estado aislante como se indica en la figura. Como se discutió anteriormente, el AKT se desarrolla cuando $N_t = 1,666$ y el potencial químico está ubicado dentro del *gap*. Este resultado contrasta con el SBMFT^{44,47}. En SBMFT la ocupación total es $N_t = 2,0$ y es independiente de la energía E_f , el sistema es siempre un aislante y la magnitud del *gap* incrementa indefinidamente a medida que avanza E_f al límite Kondo. Este diagrama de fases es consistente con los resultados experimentales con presión obtenidos para SmB_6 , los cuales muestran una transición aislante-metal debido al cierre del *gap*, seguida de un orden magnético de largo alcance cuando la presión es de $P = 10GPa$ aproximadamente¹³. En el *inset* se muestra el detalle de la región AKT, para el cual el mínimo se encuentra en $E_f = -0,912t$.

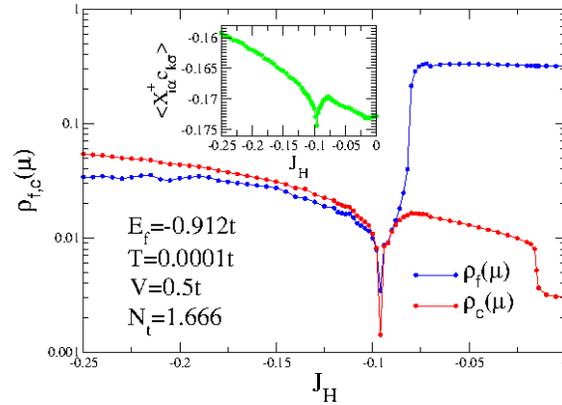


Figura 3.8.: Densidad de estados para electrones de conducción y estados localizados por la aproximación *X-boson* evaluados en el potencial químico $\mu = 0$, como una función de J_H . En el *inset* se representa la función de correlación Kondo en escala logarítmica.

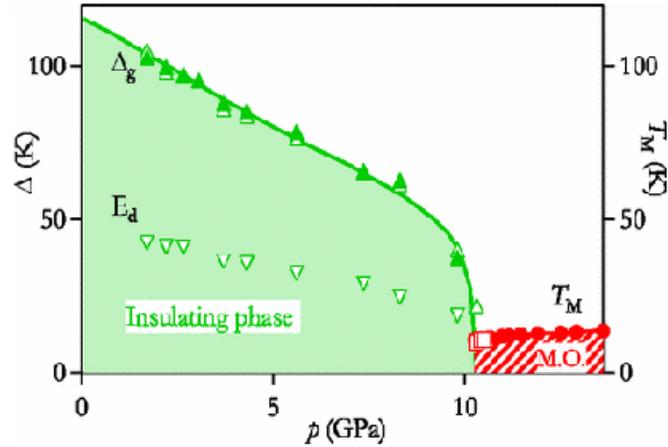


Figura 3.9.: Diagrama de fases para el SmB_6 presión en función de la temperatura T . La fase aislante es delimitada por el gap Δ_g (triángulos rellenos hacia arriba y medida teórica triángulos vacíos hacia arriba) y el ordenamiento magnético (M.O.) con la temperatura, determinado por las medidas de resistividad (cuadros vacíos). Medidas de calorimetría presentaron un comportamiento similar (círculos rellenos). Los triángulos hacia abajo corresponden a la energía de activación de los portadores localizados. datos experimentales obtenidos de Derr *et al.* 2006¹³.

3.2.2. Correlación Kondo vs. Correlación antiferromagnética f-f

Pero, ¿cómo saber que tipo de interacción es la responsable a la formación del estado AKT?. Puede que se atribuya a la fuerte correlación entre estados localizados o pueden ser un efecto de las correlaciones tipo Kondo que están presentes en el régimen de bajas temperaturas en estos sistemas. Para responder esta pregunta se estudia el comportamiento de la densidad de estados en función del acoplamiento antiferromagnético J_H y los efectos de cada una de las correlaciones.

Los resultados de la figura 3.8 para las densidades de estados f y c en el potencial químico, obtenidos en función de la intensidad del acoplamiento AFM (SRAFC), indican que la interacción AFM induce la apertura del gap alrededor de valores de $J_H \simeq -0,10$, donde las curvas $\rho_{f,c}(\mu)$ muestran un mínimo abrupto. En el *inset* de la figura 3.8 la función de correlación Kondo presenta un mínimo similar en la misma región donde aparece el gap estrecho en las densidades de estados, por lo que podemos atribuirle un carácter Kondo a esta región.

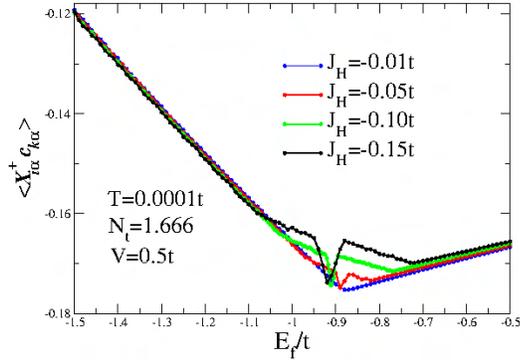


Figura 3.10.: Función de correlación Kondo $\langle X_{i\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle$, para diferentes valores de J_H , en función de la energía del estado localizado E_f .

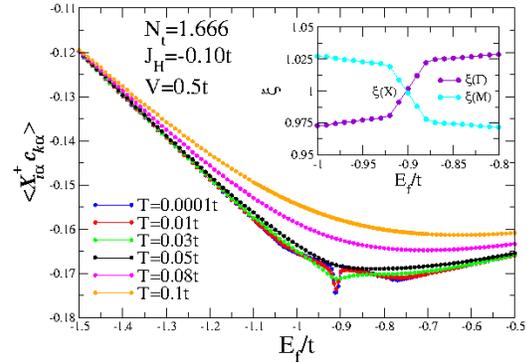


Figura 3.11.: Correlación Kondo para diferentes valores de temperatura, $\langle X_{i\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle$ en función de la energía del estado localizado E_f .

Manteniendo los parámetros de temperatura, número de ocupación e hibridización fijos, se calcula la función de correlación Kondo descrita por la ecuación 3.41, variando el nivel de energía de los estado localizados, obteniendo la figura 3.10, que muestra que el aumento del acoplamiento antiferromagnético produce un mínimo más ancho alrededor de la energía en donde se presenta el AKT. El ligero desplazamiento hacia la izquierda de los valores de energía mínimos indica un incremento de las correlaciones Kondo, una vez el número de ocupación se incrementa como se indica en la Fig 3.12 (inset).

En la figura 3.11 se dibuja la función de correlación Kondo $\langle X_{i\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle$ en la aproximación *X-boson* como una función del nivel de energía E_f , para diferentes valores de temperatura y para los mismos parámetros con los que se obtuvo la figura 3.12 (Izq.). Para altas temperaturas, el comportamiento de las funciones es “suave”, indicando que los momentos magnéticos de los átomos están distribuidos aleatoriamente, sin correlación. En el caso que se estudia aquí, un sistema 2D, se obtiene una inversión de una simple banda en el punto de alta simetría X de la zona de Brillouin, lo cual concuerda con trabajos realizados con anterioridad¹⁰ y con la expresión⁸⁷

$$\xi = -\frac{D_\sigma J_H \langle X_{i\alpha}^\dagger X_{i\alpha} \rangle}{2} = 1 + \frac{\tilde{\varepsilon}_f}{2t} [\cos(k_x) + \cos(k_y)] \quad (3.42)$$

con $\tilde{\varepsilon}_f = E_f + \Lambda - \mu$. Se obtiene que el *gap* se cierra en el punto X , cuando $\xi(X) \rightarrow 1$ como se indica en el *inset* 3.12 (Izq.) y puede verse reflejado con la formación del cono de Dirac en el punto X en la figura 3.2. Para este caso particular de conjunto de parámetros este límite se obtiene cuando $\tilde{\varepsilon}_f \rightarrow 0$ y $\mu = 0$ con energía $E_f = -0.912t$.

La correlación Kondo, disminuye a medida que las fluctuaciones térmicas se hacen más altas. Sin embargo se reporta un comportamiento inusual, cuando además de la correlación Kondo se enciende el acoplamiento antiferromagnético y un mínimo estrecho surge para el valor crítico de energía descrito con anterioridad por debajo de la temperatura $T = 0,05t$. Esto significa que ambos procesos de correlación (SRAFC y Kondo) contribuyen a la formación del *gap* del AKT. Para temperaturas $T \geq 0,05t$ los momentos magnéticos no están correlacionados y se distribuyen aleatoriamente, las curvas de correlación Kondo disminuyen lentamente conforme la energía del estado localizado se aumenta.

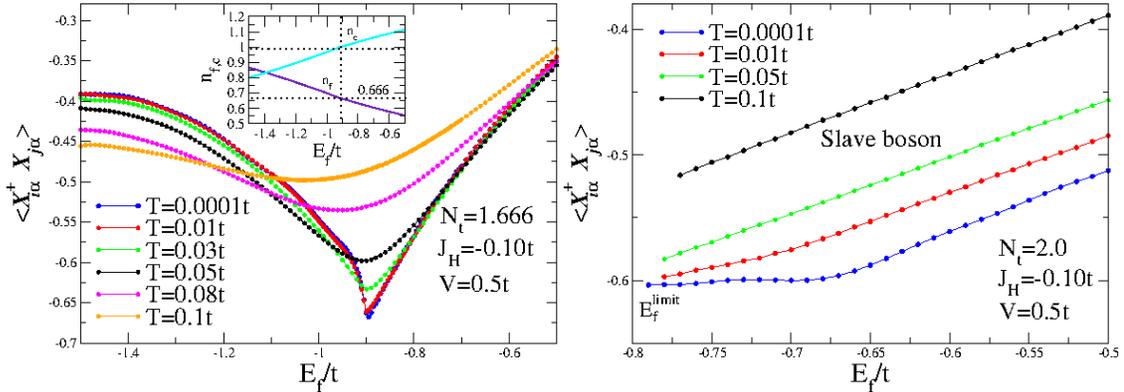


Figura 3.12.: Correlación antiferromagnética (SRAFC) por el método *X-boson* (Izq.) y para *Slave boson* (Der.) siguiendo la ecuación 3.40 $\langle X_{i\alpha}^\dagger X_{j\alpha} \rangle$ vs E_f , para diferentes valores de temperatura.

La correlación antiferromagnética entre estados localizados es dibujada en la figura 3.12 para ambos métodos, *X-boson* y *Slave-Boson*, siguiendo la ecuación 3.40. La correlación antiferromagnética por el método *X-boson*, tiende a formar un mínimo alrededor del valor de la energía crítica donde se forma el estado AKT. Este mínimo se pronuncia más notablemente a medida que la temperatura es disminuida, como muestra la figura 3.12 (Izq.). Por otro lado, no es posible capturar estas correlaciones por el método de *Slave-boson*. Para todos los casos la función de la correlación crece monótonicamente, excepto para $T = 0,0001t$ donde hay un *plateau* por debajo de $E_f/t = -0,65$ cuando $n_f \sim 1,0$, cuando el *Slave-boson* muestra comportamientos no físicos (*spurious*)^{88,89}. El comportamiento lineal en esta correlación muestra que los momentos magnéticos están distribuidos aleatoriamente sin una correlación presente.

3.3. Conclusiones y perspectivas

Considerando varios resultados experimentales obtenidos vía dispersión inelástica de neutrones, en los aislantes Kondo YbB_{12} ^{77,90}, SmB_6 ⁹¹ y $CeNiSn$ ^{79,92}, empleamos el método X -boson⁷⁴ teniendo en cuenta la competencia entre el efecto Kondo y las correlaciones anti-ferromagnéticas de corto alcance entre estados localizados (SRAFC). Calculamos las correlaciones Kondo y SRAFC y mostramos que las correlaciones de corto alcance favorecen la formación de momentos magnéticos en los átomos y al mismo tiempo la existencia de dichos momentos abren la posibilidad de cambio de espín (*spin-flip*) por dispersión de electrones de conducción generando el efecto Kondo. También estudiamos la evolución del gap topológico en el potencial químico en función de la temperatura, obteniendo que el sistema atraviesa una transición de fase aislante-metal cuando se incrementa la temperatura, como ocurre en los aislantes Kondo reales.

También se calculó la estructura de bandas a lo largo de los puntos de alta simetría en la zona de Brillouin $\Gamma - X - M - \Gamma$. Mostrando que el sistema cierra el *gap* en el punto X , con la formación de cono de Dirac con la correspondiente inversión de bandas, lo cual es consistente con estudios anteriores¹⁰.

Además calculamos el diagrama de fases como una función de la posición de la energía E_f , desde la red vacía hasta el régimen Kondo. El sistema desarrolla dos fases: una fase metálica de electrones pesados, una vez los procesos de conducción son dominados por los electrones f y AKT, esta última fase ocurre en una región muy restringida de valores E_f , y es formada debido a la existencia de SRAFC. Lo más notable aquí es que la presencia de fuertes correlaciones cambian completamente la situación en relación a trabajos previos empleando bandas no correlacionadas⁹³ o SBMFT^{9,44}, donde la transición topológica ocurre entre estados aislantes. Aquí la transición topológica ocurre entre estados metálicos de fermiones pesados capturando la estructura de cono de Dirac del AKT. Este resultado está de acuerdo a medidas experimentales recientes⁹⁴ las cuales detectan que el SmB_6 en el plano (011) hospeda una superficie metálica con una masa efectiva de orden $[10 - 10^2]m_0$ y es consistente con resultados experimentales dependientes de la presión en el SmB_6 . En estos resultados se muestra una transición aislante-metal debido al colapso del *gap* surgiendo un orden magnético de largo alcance aproximadamente a $P = 10GPa$ ¹³.

El potencial químico presenta una transición estrecha y abrupta cuando la energía del nivel localizado (E_f) varía cruzando la región Kondo topológica mientras los números de ocupación evolucionan continuamente. Esta transición puede ser usada como un criterio adicional para caracterizar experimentalmente el sistema.

También se presentan la densidad de estados para los electrones de conducción y para los estados localizados las cuales muestran la apertura del pseudo-*gap* en forma de V en el potencial químico debido a las SRAFC. Este tipo de resultado es una consecuencia del uso de la representación $\Gamma_8^{(1)}$. En un reciente trabajo experimental¹², los autores asocian el *gap* Δ_2

con la representación $\Gamma_8^{(1)}$, como factor determinante a la intensidad de los estados *in-gap*. Estos resultados pueden ser relevantes para estudiar los aislantes Kondo como el *CeNiSn*, el cual exhibe un *gap* de espín originado de SRAFC^{79,92} y una densidad de estados con *V-shaped*^{95,96}.

4. Propiedades ópticas de Aislantes Kondo topológicos

En este capítulo se resuelve el modelo de Anderson Periódico por medio de la aproximación *X-boson* identificando los espectros de fotoemisión correspondientes al sistema de Aislantes Kondo Topológicos teniendo en cuenta diferentes valores de la correlación de corto alcance entre estados localizados representadas por J_H , pretendemos describir el comportamiento a bajas temperaturas.

La espectroscopía de fotoemisión (en inglés *photoemission spectroscopy*: PES) es usada para determinar la estructura de bandas en átomos y moléculas⁹⁷. El método experimental consiste en bombardear con radiación de alta energía como radiación ultravioleta (UV) o rayos-X que debido al efecto fotoeléctrico liberan electrones con cierta energía cinética registrada por detectores. Con la energía de los fotones incidentes $h\nu$ y la energía de los electrones E_K es posible calcular la energía de enlace (E_B)

$$E_B = h\nu - E_K, \quad (4.1)$$

donde h corresponde a la constante de Planck ($6,6 \times 10^{34} J \cdot s$) y ν la frecuencia de fotón en Hertz. La gráfica de PES se presenta en función de la energía de enlace. Los picos en el espectro representan electrones presentes en los diferentes niveles de energía del átomo. Los picos con menor energía de enlace representan electrones en los niveles de energía más externos, es decir en la banda de valencia, mientras que los de mayor energía de enlace representan electrones en los niveles más internos, tal como se ilustra en la figura 4.1. Considerando un único estado localizado, descrito por el modelo de Anderson periódico, se reproducen las propiedades más relevantes para compuestos de *Ce*. En dicho modelo se observa la transición $4f^0 \rightarrow 4f^1$, ($4f^{14} \rightarrow 4f^{13}$ en compuestos de *Yb*) cerca al nivel de Fermi

Los aislantes Kondo son clasificados como semiconductores con un *gap* muy estrecho en la *bulk*, como resultado de la fuerte correlación electrónica y la hibridización entre los estados $4f$ magnéticos y la banda de conducción, como se observa en la figura 4.2^{98,99}. Los compuestos $Ce_3Bi_4Pt_3$, YbB_{12} y SmB_6 hacen parte de este tipo de materiales. En el caso de los compuestos de *Ce* el promedio de ocupación del nivel $4f$ es cercano a uno, cercano al límite Kondo, estos compuestos presentan principalmente superposiciones entre estados no magnéticos $4f^0$ y los portadores de momento magnético $4f^1$. En los compuestos de *Yb* se

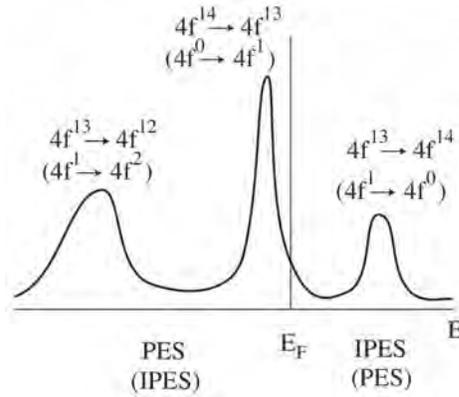


Figura 4.1.: Ilustración de la densidad de estados espectral para compuestos de valencia intermedia observados por espectroscopía de fotoemisión y espectroscopía de fotoemisión inversa.

consideran compañeros simétricos electrón-hueco de los compuestos de Ce que envuelven configuraciones $4f^{14}$ y $4f^{13}$. En el caso del SmB_6 tenemos un sistema fuertemente correlacionado con valencia intermedia que involucra configuraciones $4f^6$ no magnéticas y $4f^5$ magnéticas que tienen un pequeño término de división^{100,101}. Usualmente este tipo de compuestos son descritos por el modelo de Anderson periódico y en una primera aproximación se soluciona por teorías de campo medio como *slave boson* que envuelven un electrón o hueco $4f$. Un importante resultado de campo medio es que la hibridización entre electrones $c - f$ independiente de k conduce a una banda hibridizada renormalizada con un brazo superior E_g^+ y otro inferior E_g^- los cuales tienen carácter f y c reproduciendo muy bien el pseudogap alrededor de la temperatura Kondo T_K . Además se puede obtener un *gap* directo de tamaño $2V$ y un *gap* indirecto de hibridización de ancho $\Delta_g \sim T_K$ cercano al nivel de Fermi como se muestra en la figura 4.2.

En este capítulo pretendemos mostrar la evolución de este pseudogap con la temperatura y efectos de correlación de corto alcance observadas experimentalmente en el aislante Kondo topológico SmB_6 ¹⁰².

En el SmB_6 se presenta una resistividad a bajas temperaturas cuando es dopado por impurezas mientras las impurezas no magnéticas son insensibles y su resistencia de saturación permanece sin cambios¹ otras propiedades de transporte han sido bien estudiadas en función de la temperatura mostrando que para altas temperaturas el SmB_6 se comporta como un “mal” metal correlacionado, con una transición metal-aislante al bajar la temperatura debido a la hibridización entre estados localizados y electrones de conducción^{103,104}. Esta insensibilidad de los electrones de conducción da cuenta de la protección topológica de los estados superficiales ante el cambio $k \rightarrow -k$ en la dispersión, debido a la simetría de in-

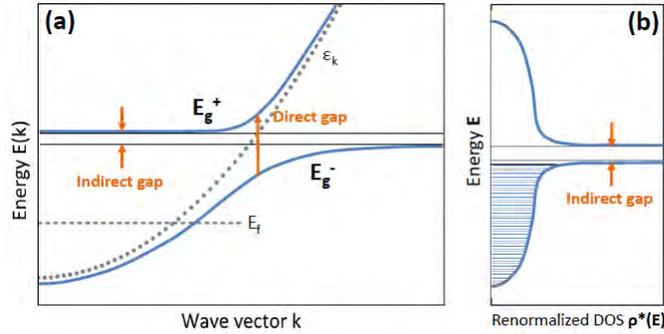


Figura 4.2.: Esquema de diagrama de bandas hibridizadas en un sistema de aislantes Kondo. (a) Las líneas punteadas representan la energía del nivel no hibridizado E_f y la banda de conducción ε_k . La hibridización $c - f$ produce la formación de las bandas de Fermi separada en dos niveles E_g^+ y E_g^- . (b) Densidad de estados renormalizada donde se muestra el *gap* indirecto cercano al nivel de Fermi. El *gap* de hibridización ha sido observado en medidas de conductividad óptica con un delgado pico de Drude a bajas frecuencias, separado de una componente interbanda asociada con los electrones de conducción¹⁴.

versión temporal (*time reversal symmetry*, TRS) como es usual en un aislante topológico. Los estados superficiales metálicos son soportados por resultados experimentales de torque magnético¹⁰⁵, experimentos de fotoemisión (PES: *photoemission spectroscopy*)¹⁰⁶ y ARPES (*angle-resolve photoemission spectroscopy*)^{107,108}, los cuales muestran la fuerte competencia entre la ocupación de valencia intermedia, las correlaciones de corto alcance y el efecto Kondo; esto indica que el entendimiento del surgimiento de los estados superficiales del SmB_6 no es un asunto trivial.

4.0.1. Número de ocupación

El número de ocupación de los electrones de conducción representado por fermiones renormalizados de la banda de conducción $n_c = \sum_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma}$ y que tienen la simetría correcta para hibridizar con los estados localizados f , no siempre necesita estar conmensurado (es decir, uno para cada banda), los electrones itinerantes pueden ser compartidos con otras bandas de conducción. En lenguaje estricto, para el modelo de la red de Kondo la ocupación es $n_c = 1$ con simetría electrón-hueco para la banda efectiva, este caso puede representar apropiadamente compuestos como $Ce_3Bi_4Pt_3$, SmB_6 , YbB_{12} , $CeNiSn$ y SmS ¹⁰⁹. En este trabajo se tienen en cuenta tanto las fluctuaciones de carga, como las de espín, contrario al modelo de la red de Kondo (*Kondo lattice model*) donde se consideran solamente las fluctuaciones de espín con ocupación entera para los estados localizados (límite Kondo). Aquí, se tiene en cuenta la valencia intermedia presente en aislantes como el SmB_6 . Esta valencia

intermediaria es usada para explicar la anomalía presente en la conductividad eléctrica a bajas temperaturas⁸². Estas anomalías son atribuidas a la presencia de estados dentro del *gap* que se piensa, surgen por la competencia entre la fuerte interacción espín-órbita, la hibridización de los electrones *c-f* y las fuertes correlaciones electrónicas, y que son evidenciados en experimentos de oscilaciones cuánticas¹⁰⁵.

Sin tener en cuenta el tiempo de relajación, ni las interacciones electrón-electrón el espectro de fotoemisión puede ser expresado como el producto entre las funciones de onda de los estados inicial (ϕ_i) y final (ϕ_f). Sin embargo, para interacciones de muchos cuerpos el espectro de fotoemisión es representado por la función espectral ($A(k, \omega)$) la cual incluye la interacción de muchos cuerpos. La función espectral es dada por

$$A(k, \omega) == \left(\frac{-1}{\pi} \right) \Im \{ G_{\mathbf{k}\sigma, \alpha}^{ff}(z) + G_{\mathbf{k}\sigma, \alpha}^{cc}(z) \}. \quad (4.2)$$

En nuestro tratamiento consideramos efectos de muchos cuerpos, vía aproximación *X-boson* para el modelo de Anderson periódico, las funciones de Green en este caso están definidas en las ecuaciones (2.4), (2.5) y (2.6). En el caso particular del modelo desarrollado en esta tesis por medio del tratamiento *X-boson*, la función espectral puede ser representada por el producto de la hibridización dependiente del vector momento en dos dimensiones k_x y k_y y la densidad de estados de los electrones *f* y *c*, $V(\mathbf{k}) [\rho_f(\omega) + \rho_c(\omega)]$ ^{110,111,112,113}.

$$PES = \left(\frac{1}{4\pi^2} \right) \int_{-\pi}^{\pi} dk_x \int_{-\pi}^{\pi} dk_y n_F(\omega, T) \times |V(\mathbf{k}_x, \mathbf{k}_y)|^2 A(k, \omega), \quad (4.3)$$

$$IPES = \left(\frac{1}{4\pi^2} \right) \int_{-\pi}^{\pi} dk_x \int_{-\pi}^{\pi} dk_y (1 - n_F(\omega, T)) \times |V(\mathbf{k}_x, \mathbf{k}_y)|^2 A(k, \omega). \quad (4.4)$$

El espectro de fotoemisión resuelto en ángulo es calculado usando

$$ARPES = n_F(\omega, T) |V(\mathbf{k}_x, \mathbf{k}_y)|^2 A(k, \omega). \quad (4.5)$$

aquí $n_F(\omega, T)$ es la función de distribución de Fermi-Dirac.

4.1. Resultados para el Espectro de fotoemisión

Usando la ecuación para PES/IPES (4.3, 4.4) se obtienen los resultados de la figura 4.3, donde se muestra el espectro de fotoemisión para diferentes valores de temperatura fijando la energía de los estados localizados en $E_f = -0,912t$, la interacción antiferromagnética entre estados localizados en $J_H = -0,10t$, para un número de ocupación constante de $N_t =$

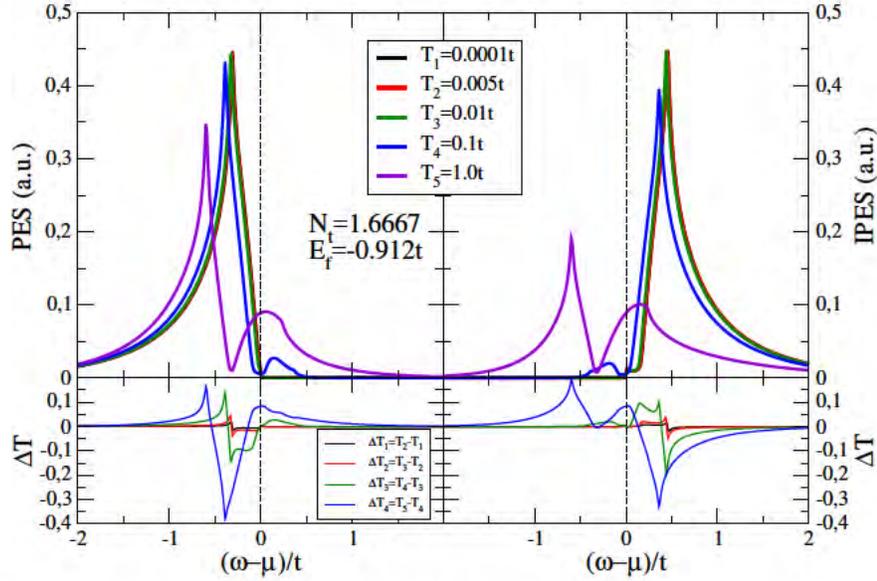


Figura 4.3.: Espectro de fotoemisión para el modelo de aislantes Kondo topológicos en dos dimensiones. Para una energía $E_f = -0,912t$ con ocupación total $N_t = 1,6667$ e interacción $J_H = -0,10t$, parámetros para los cuales se mantiene una condición aislante Kondo topológico. Las figuras inferiores muestran las diferencias de ocupación electrónica alrededor del nivel de Fermi con el cambio de temperatura. ΔT corresponde a la diferencia de las respuestas de PES/IPES en temperatura.

1,6667 resolviendo el Hamiltoniano de forma autoconsistente. El sistema conserva la simetría entre los espectros de PES e IPES por debajo de la temperatura $T = 0,01t$, temperatura donde el sistema conserva su estado de aislante Kondo topológico. Para temperaturas más altas ($T > 0,01t$) el sistema aumenta la cantidad de portadores sobre el nivel de Fermi proporcionando al sistema un carácter metálico. Aunque ambos espectros muestran un pico más alto y agudo cerca a $\omega - \mu = 0,5t$ característico del acoplamiento f - c , es posible notar un hombro sutil en las diferencias de temperatura $\Delta T_3 = T_4 - T_3$ donde el sistema efectúa el cruce de un carácter metálico a uno de aislante Kondo topológico como se ilustra en la figura 4.4, se grafican los espectros para dos temperaturas alrededor de la transición metal-AKT. El espectro completo tanto en PES (4.4 a) como en IPES (4.4b) sufren un corrimiento en energía y los hombros de la diferencia en cada espectro están ubicados en $-0,0889t$ y $0,1614t$ respectivamente. Las figuras 4.4c y 4.4d son antisimétricas y el hombro cambia de signo indicando mayor cantidad de portadores en los estados superficiales en la diferencia en PES en el estado AKT, mientras que en IPES se presenta menor contribución de portadores en el nivel de Fermi. Estos estados superficiales también son asociados al multiplete $4f^n \rightarrow 4f^{n-1}$) responsable de los estados superficiales del sistema en el estado AKT, como se muestra en los resultados de densidad de estados el comportamiento en forma de V típico de un semimetal.

En la figura 4.4c representa el cambio de la energía de enlace con temperatura para el pico de mayor contribución referente a la resonancia Kondo en un sistema de valencia intermedia como el SmB_6 . El comportamiento es ajustado a una ley de potencias $y = ax^b + c$:

$$\omega - \mu = -0,2952T^{0,5259} - 0,3044t, \quad \text{PES}; \quad \omega - \mu = -0,313T^{0,4781} + 0,47t \quad \text{IPES}. \quad (4.6)$$

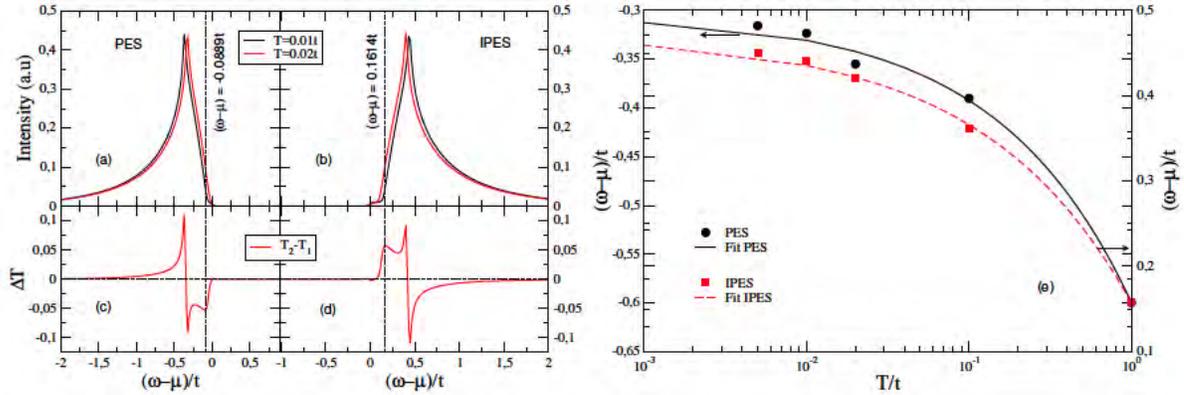


Figura 4.4.: Espectros de PES (a) e IPES (b) para $T = 0,01t$, temperatura donde el sistema se encuentra en estado AKT y $T = 0,02t$ para el sistema en estado metálico. (c) y (d) muestran las diferencias de portadores en el nivel de Fermi ($\omega - \mu = 0 - 0t$). (e) corresponde al corrimiento del pico máximo en la respuesta de PES/IPES para las diferentes temperaturas.

En la figura 4.5 se observa el comportamiento de los espectros de PES (4.5a) e IPES (4.5b) para diferentes valores de acoplamiento AFM. Los espectros son calculados para cada valor de J_H con su respectivo valor de energía correspondiente de estado topológico. El comportamiento respecto al acoplamiento AFM muestra un corrimiento en la energía del pico principal como se observa en la figura 4.5I. Un segundo cambio importante es el cambio de portadores en el nivel de Fermi. En ausencia de correlaciones AFM ($J_H = 0,0t$) la cantidad de portadores sobre el nivel de Fermi es mayor respecto al sistema con fuertes correlaciones ($J_H = -0,15t$) donde el sistema además de disminuir la cantidad de portadores en torno al nivel de Fermi, tiende a abrir un *gap* real como se muestra en el *inset* 4.5I.

Para estudiar los estados superficiales presentes en el cono de Dirac para el estado topológico es interesante ver los cambios de la respuesta de PES calculadas en los puntos de simetría relevantes $X = [k_x = 0, k_y = 1]$ y $\Gamma = [k_x = 0, k_y = 0]$ cuando el sistema se encuentra en estado topológico para observar la evolución de dichos estados superficiales con la temperatura. En las figuras 4.7(Izq) y 4.7(Der.) se calculan los espectros de fotoemisión en los puntos de simetría X y Γ respectivamente. En los resultados para X se puede notar un valor máximo alrededor de $\omega - \mu = -0,01t$ correspondiente a la hibridización $c-f$, que no cambia significativamente en temperaturas correspondientes al régimen AKT. Además, para

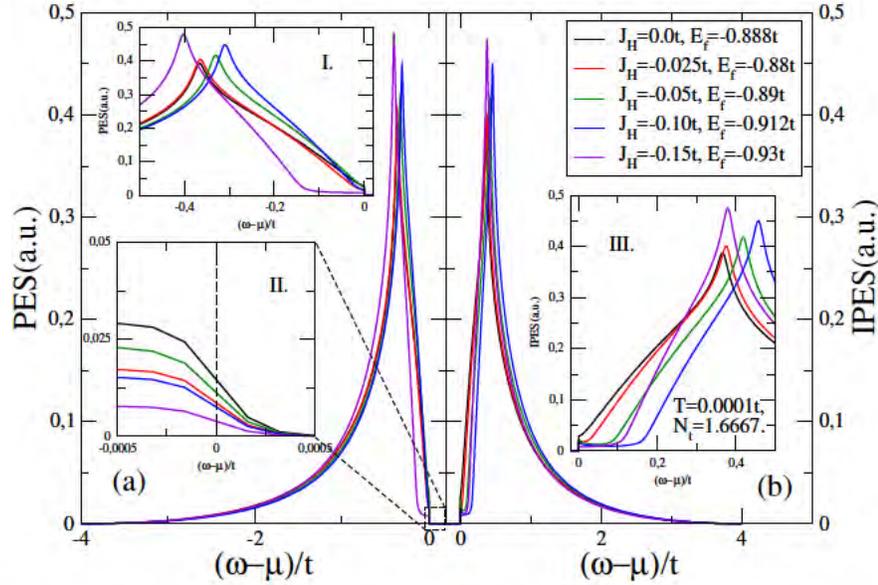


Figura 4.5.: Espectro de fotoemisión para el estado aislante topológico variando las correlaciones de corto alcance (J_H). El *inset* I/III corresponde a un acercamiento del pico principal en los resultados de PES/IPES. El *inset* (II) sobresalta la disminución de portadores de carga con la temperatura alrededor del nivel de Fermi, disponibles para el transporte electrónico.

energías más cercanas al nivel de Fermi ($0,0025t$) se encuentra un hombro que se ve afectado por el cambio de temperatura, disminuyendo conforme aumenta la temperatura lo cual es consistente con resultados experimentales realizados por Neupane *et al.* (2013)¹⁵ usando ARPES a baja temperatura en un rango de 6K a 30K con un barrido de momentum de $k_1 = -0,06\text{\AA}$ a $k_2 = 0,02\text{\AA}$ (figura 2c Neupane *et al.* (2013)¹⁵). En el punto de simetría Γ (4.7 (Der.)), también se observa una disminución del máximo alrededor de este valor de energía aunque la intensidad en Γ es dos ordenes de magnitud menor que en X . Este cambio indica la desaparición del hombro el cual representa estados superficiales en $T = 0,001t$ y con él disminuyen los portadores responsables de los estados superficiales en el punto de simetría X en nuestros cálculos. Estos estados no son evidentes en el punto de simetría Γ como se muestra en resultados experimentales figura 4.6 (figura 2d Neupane *et al.* (2013)¹⁵).

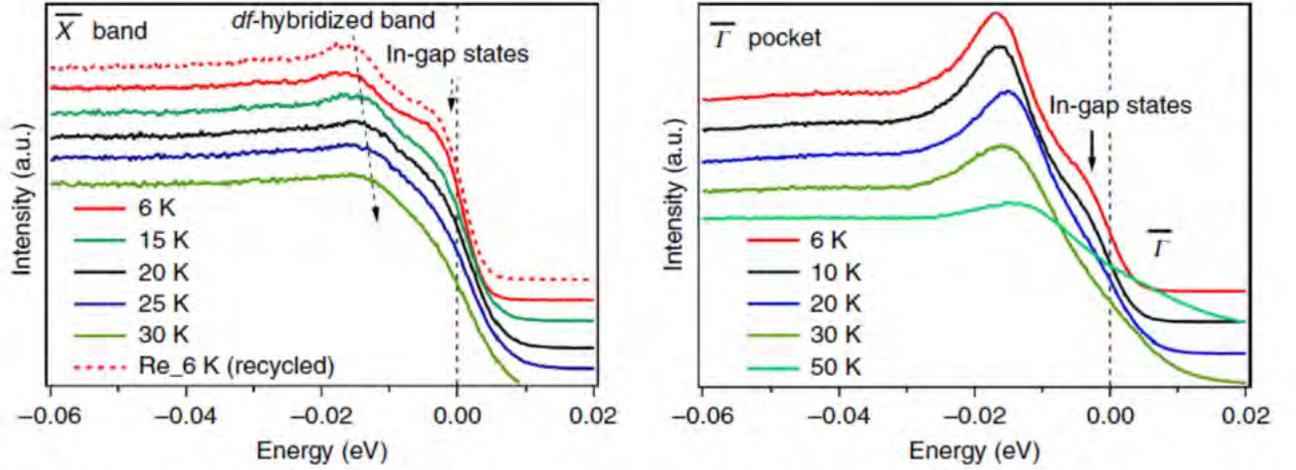


Figura 4.6.: Resultados experimentales de espectro de fotoemisión para el SmB_6 tomados en las direcciones de los puntos de alta simetría X y Γ para el estudio de *in-gap states* en diferentes valores de baja temperatura (Neupane *et al.* 2013)¹⁵.

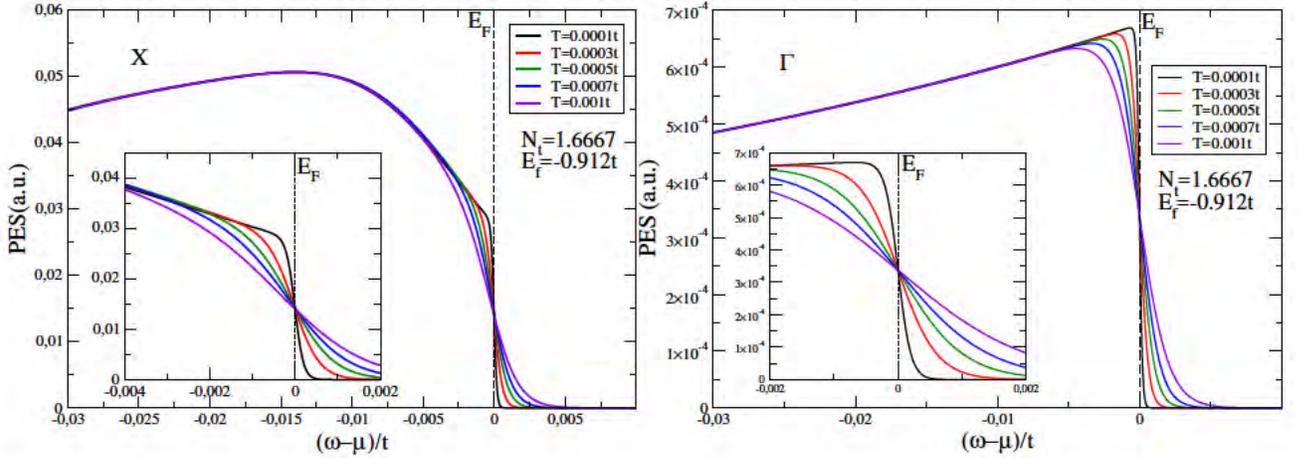


Figura 4.7.: Cálculo de PES para los puntos de simetría X (Izq.) y Γ (Der.) para diferentes valores de temperatura. Los *insets* corresponden al acercamiento en torno al nivel de Fermi.

4.2. Espectroscopía de fotoemisión con resolución angular

A continuación se estudian los resultados referentes a la técnica experimental de espectroscopía de fotoemisión con resolución angular o ARPES (*Angle Resolve Photoemission Spectroscopy*). Estos resultados se obtienen calculando el espectro de fotoemisión definido en las ecuaciones (5.12) y (5.14) para cada uno de los valores de k_x y k_y . El carácter topológico del SmB_6 de la superficie metálica en el *plateau* de la resistividad a bajas temperaturas o *in-gap*

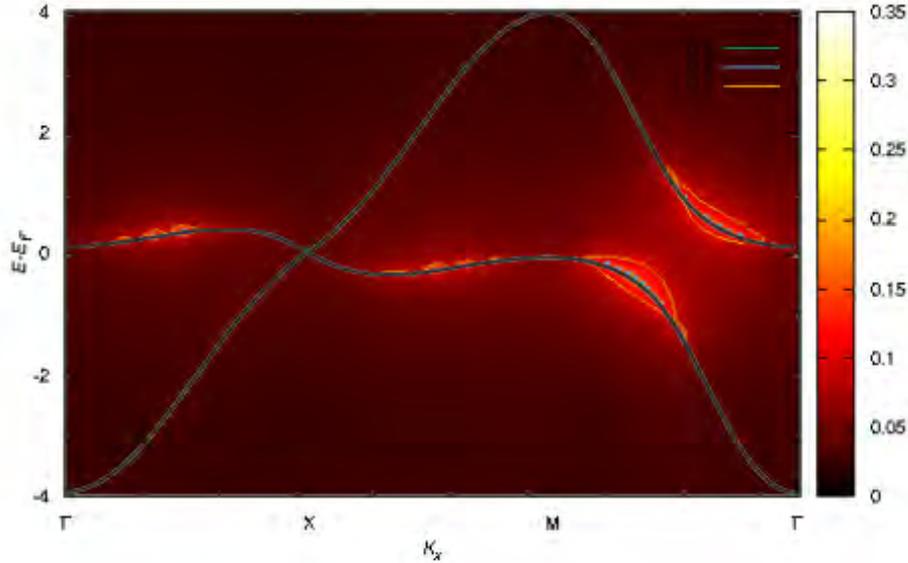


Figura 4.8.: Relación de dispersión evaluada en los puntos de alta simetría $\Gamma - X - M - \Gamma$.

states fueron observados en resultados de dispersión de neutrones, calor específico e imágenes experimentales de ARPES^{78,106,114,115,116}. Aquí se estudia el efecto de las correlaciones entre estados localizados y el carácter topológico con el cambio en la señal de ARPES. En este aparte usaremos el modelo ya desarrollado para intentar reproducir estas evidencias experimentales^{11,15,76,117} teniendo en cuenta los parámetros donde el sistema presenta un estado AKT y de manera análoga a los cálculos efectuados para PES se estudia el comportamiento con temperatura y con el cambio de interacciones AFM.

La primera zona de Brillouin está demarcada por los ejes k_x y k_y en el rango $[-\pi/a, \pi/a]$ ($a = 1$ es el parámetro de red). Las regiones del espectro que se encuentran con alguna ocupación electrónica están demarcados por la intensidad en el gráfico de contorno.

4.2.1. Resultados de ARPES con variación de interacciones AFM de corto alcance.

En el capítulo anterior se discutió el diagrama de bandas obtenido incluyendo las fuertes correlaciones entre estados localizados teniendo en cuenta la hibridización entre los estados localizados y los electrones de conducción los cuales muestran la existencia de estados superficiales atribuidos a los aspectos topológicos entre la superficie y el bulk y que han sido

mostrados experimentalmente usando oscilaciones cuánticas de Haas Van Alphen (dHvA) en 2D¹⁰⁵. Aquí aprovechando las funciones de Green resueltas por el método *X-boson* para describir las propiedades exóticas de los AKT por medio de la densidad espectral se muestran los resultados de ARPES (ec. 4.5). A diferencia de los cálculos de PES/IPES ARPES no necesita integrar y el resultado corresponde a la respuesta del espectro para cada valor de k_x, k_y . El diagrama de bandas obtenido con el tratamiento de *X-boson* superpuesta a la densidad espectral siguiendo la ruta de del diagrama de bandas ($\Gamma - X - M - \Gamma$) como se muestra en la figura 4.8 ilustrando el estado topológico obtenido con anterioridad para el punto de simetría X .

De la figura 4.8 se obtienen que las bandas de la estructura multiplete Γ_8^1 mostrando la formación del cono de Dirac en el punto de simetría \mathbf{X} sin embargo la intensidad de la densidad espectral es muy baja comparada con los aportes de las bandas en el punto de simetría \mathbf{M} que forman el *gap* estrecho del *bulk*. Se han calculado k_x y k_y en el rango $[-\pi, \pi]$ en el eje xy el valor en z corresponde a la señal de ARPES en unidades arbitrarias.

4.2.2. Resultados de ARPES con variación en temperatura

La figura 4.9 presenta resultados para la relación de dispersión en la parte superior a bajas temperaturas, para distintos valores del acoplamiento antiferromagnético J_H , entorno al punto X , en donde se presente la inversión de bandas asociada al acoplamiento *spin-orbita* que origina el cono de Dirac presente en el estado aislante Kondo topológico, además de los resultados de ARPES en el panel inferior para una temperatura $T = 1 \times 10^{-4}t$ en el régimen de valencia intermediaria $N_t = 1,6667$.

Para $J_H = 0,0t$, es decir sin correlación AFM entre los estados localizados, los resultados de ARPES evidencian la presencia de un estado metálico paramagnético con una superficie de Fermi “larga”, asociado a las formaciones entorno de los puntos M en las esquinas, a su vez la estructura “circular” de mayor intensidad alrededor del punto Γ manifiesta la existencia de correlaciones AFM^{118,119} que deben estar asociadas a la presencia del efecto Kondo, caracterizado por el acoplamiento AFM entre el *spin* de los electrones itinerantes y el de los estados localizados, este efecto renormaliza la masa efectiva de los electrones de conducción entorno al potencial químico (μ), otorgándoles una masa efectiva alta, originando el carácter *heavy Fermion* del sistema y generando la superficie de Fermi “larga”. Estos resultados son consistentes con la presencia de una estructura de bandas en torno al punto X (panel superior figura 4.9), que muestra un corte en el nivel de Fermi, típica de un estado metálico. Además de los resultados presentados en la figura 3.4 del capítulo anterior, en donde se evidencia la presencia de una forma *V-shape* en la densidad de estados ligada al carácter topológico del sistema derivado de la interacción *spin-orbita*, con un valor alto para la densidad de estados

en el potencial químico de los electrones localizados, estos se hibridizan con los electrones de conducción y contribuyen a formar una superficie de Fermi metálica, como indican los resultados de ARPES.

Para $J_H = -0,05t$ los resultados de ARPES muestran la “desaparición” de la estructura con mayor intensidad alrededor del punto Γ , como se aprecia en la figura 4.9 el nivel de Fermi pasa por debajo del punto Γ , esto indica el tránsito hacia una región aislante, es decir la entrada en una condición en donde se presenta la apertura de un *gap* para la densidad de estados, lo cual es consistente con los resultados expuestos en la figura 3.5 del capítulo anterior, en donde se evidencia la formación del *gap* entorno al potencial químico para la densidad de estados localizados, nuevamente presentando la *V-shape* debido a la presencia de la interacción *spin-orbita*, esto es: obtenemos el pseudo-*gap* característico de sistemas Aislante Kondo. El gráfico superior correspondiente a la estructura de bandas entorno al punto X , indica que el nivel de Fermi aún corta la relación de dispersión, pero no en el punto en donde se presenta el cono de Dirac, esto es, tenemos un sistema aislante Kondo con un pseudo-*gap* en la densidad de estados, lo cual es consistente con resultados experimentales para estos compuestos^{120,121}, pero no estrictamente aislante topológico.

En el caso $J_H = -0,10t$ los resultados de la relación de dispersión muestran la formación de un cono de Dirac entorno al punto X , el cruce asociado a la inversión de bandas se da justo en el potencial químico, indicando la presencia de un estado aislante topológico. Este resultado es consistente con lo obtenido en las figura 3.5 del capítulo anterior, en donde se evidencia la formación de un *gap* en *V-shape* entorno al potencial químico para la densidad de estados, cuyo ancho es máximo para este valor de J_H . Las figuras 3.7 y 3.8 muestran que las densidades de estados en el potencial químico para los electrones localizados e itinerantes en función de J_H y $E - f$ (energía de los estados localizados), poseen un mínimo en el valor de los parámetros utilizados, el *inset* de la figura 3.8 indica además que la función de correlación Kondo presenta un mínimo asociado a la obtención del estado aislante Kondo topológico para el sistema. Tal como se concluyó en el capítulo anterior, la presencia de las correlaciones AFM entre estados localizados, para este conjunto de parámetros, contribuye a obtener el carácter aislante Kondo topológico del sistema, en torno del punto X y a partir de una transición metal–aislante Kondo topológico–metal, tal como se observa en trabajos experimentales para el SmB_6 ^{10,46,104,122}. Los resultados de ARPES indican la presencia de estados paramagnéticos con una superficie de Fermi “*large*” (“*pockets*” en torno a los puntos M ¹¹⁸, además de un mínimo en el punto Γ , pero con una “nube difusa” alrededor del mismo. Atribuimos la presencia de esta “nube difusa” a las contribuciones “conductoras” típicas de los estados de borde propias de los aislantes topológicos. En torno a los valores correspondientes al punto X se revela la presencia de una región “brillante” (con mayor intensidad)

muy localizada, esta contribución al ARPES está asociada a la manifestación del cono de Dirac en el punto X , como todo el espectro de ARPES se calculó para el valor de frecuencia $\omega = \mu$ (en el potencial químico), lo que tenemos es el cruce de las bandas que forman el cono de Dirac justo en el valor del potencial químico, esto es, la presencia de un estado aislante topológico.

Por último, para el valor de $J_H = -0,15t$, los resultados de ARPES indican la presencia de estados paramagnéticos con una superficie de Fermi “*large*” (*pockets* entorno a los puntos M), presencia de estados conductores con correlaciones AFM, evidenciados por altos valores entorno al punto Γ , seguramente asociadas a la presencia del efecto Kondo (que contribuye a generar la superficie de Fermi “*large*”) y la propia correlación AFM entre estados localizados; como en casos anteriores en el punto Γ el valor de ARPES tiene un mínimo, asociado a la presencia de un *V-shape* pseudogap en la densidad de estados, que se evidencia en la figura 3.5. Los resultados para la relación de dispersión indican que el nivel de Fermi cruza la estructura de bandas fuera del punto en donde se cruzan las bandas, es decir no se tiene el carácter de aislante topológico. En resumen para este conjunto de parámetros tenemos un semi-metal convencional con una superficie de Fermi “*large*”, seguramente asociada a la re-normalización de las características de los electrones de conducción debido a las correlaciones presentes en el sistema.

A continuación encontramos la figura 4.10 se reportan los resultados de ARPES con evolución en temperatura para los parámetros que reproducen el estado topológico ($J_H = -0,10t$) a bajas temperaturas con estados superficiales en el punto de simetría X .

A bajas temperaturas se parte de la condición aislante Kondo topológico, tal como se describió en la figura 4.9 para el conjunto de parámetros con $J_H = -0,1$, al incrementar la temperatura se puede apreciar que la “nube difusa” entorno al punto Γ se va tornando menos “difusa” en los tres primeros gráficos, además está presente el cono de Dirac en el punto X , evidenciado por los pequeños “círculos” brillantes que se aprecian en las posiciones del punto X en la primera zona de Brillouin; podemos decir que hasta el tercer valor de temperatura, el sistema preserva su carácter aislante Kondo topológico, la mayor presencia de contribuciones al ARPES entorno al punto Γ , indican una transición paulatina aislante Kondo topológico hacia un estado con un pseudo-*gap* y presencia de correlaciones AFM, seguramente ligadas al efecto Kondo y la interacción entre estados localizados, el efecto Kondo además se manifiesta por la presencia de “*pockets*” en las “esquinas” (puntos M) que denotan la existencia de una superficie de Fermi “*large*”. En la cuarta figura desaparecen los “círculos” entorno a los puntos X , indicando que se salió del estado aislante topológico, la presencia de los *pockets* en los puntos M indican una superficie de Fermi *large*, la alta intensidad entorno al punto Γ , además de la baja intensidad en el punto Γ , indican la presencia de un estado ais-

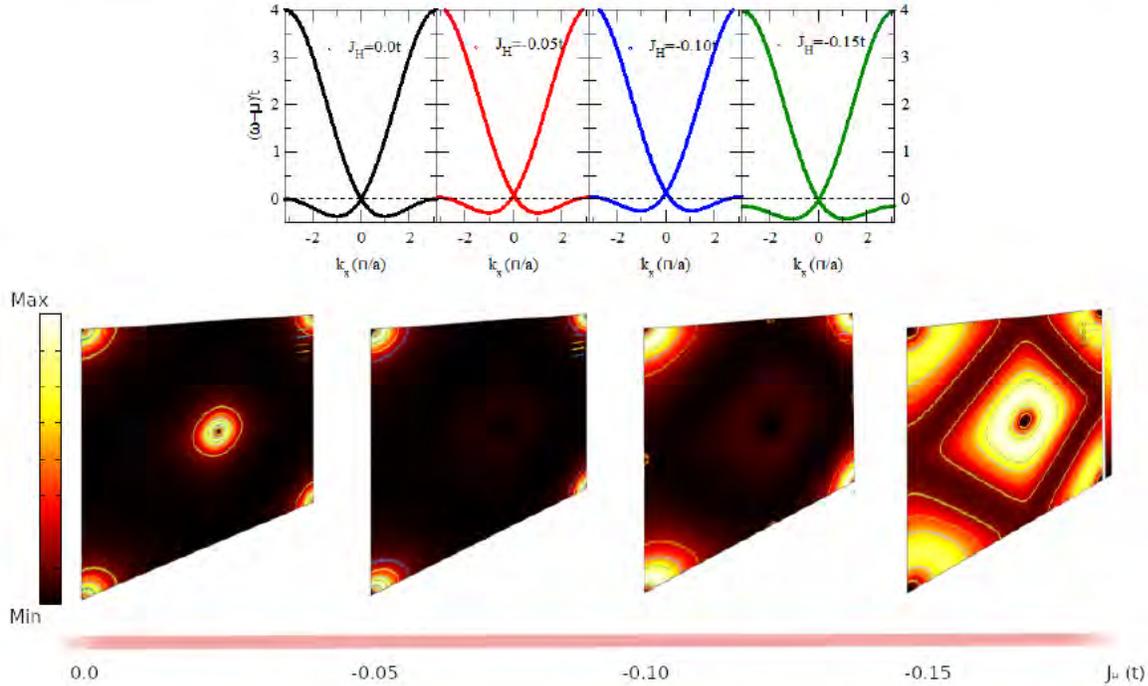


Figura 4.9.: El panel superior corresponde al diagrama de bandas para cada valor J_H en sus respectivos valores de energía que muestra el cono de Dirac. En el panel inferior se muestra la evolución de la respuesta de ARPES en la primera zona de Brillouin con variación de la interacción antiferromagnética entre estados localizados.

lante, seguramente con un pseudo-*gap* en el potencial químico y fuertes correlaciones AFM, muy seguramente ligadas a la presencia aún del efecto Kondo, que renormaliza la estructura de bandas y genera una *large Fermi surface*. Esto es, básicamente tenemos un aislante Kondo convencional. Podríamos decir que las cuatro primeras gráficas indican la transición desde un estado aislante Kondo topológico a un estado aislante Kondo, la temperatura de transición topológica debe de ser próxima a la temperatura de la cuarta gráfica, además, esta temperatura debe de estar por debajo de la temperatura Kondo del sistema. El *inset* de la figura 1.4, muestra la transición del sistema desde un estado aislante Kondo topológico a un estado metálico a una temperatura de $T = 0,2t$, preservándose un estado aislante con un *pseudo-gap V-shape* asociado a la presencia del acoplamiento *spin-orbit*, entorno al potencial químico para los valores de temperatura $T < 0,2t$, la sola densidad de estados no nos indica si el sistema se encuentra en el estado aislante topológico o no (no nos dice si el nivel de Fermi “corta” justo en el punto donde se cruzan las bandas al formar el cono de Dirac), pero si nos indica que el sistema tiene un carácter aislante similar al de los aislantes Kondo convencionales. Desde la quinta y hasta la octava figura, la no presencia de los *pockets* entorno a los puntos M , indica la ausencia de una superficie de Fermi *large*, además la caída paulatina en la intensidad de la estructura entorno al punto Γ al aumentar la temperatura,

revela la disminución paulatina de correlaciones AFM en el sistema, muy seguramente estos hechos están asociados al “declive” del efecto Kondo, esto es, el valor de temperatura de la quinta figura debe de ser superior a la temperatura de Kondo del sistema; a medida que se incrementa la temperatura se “anula” aún más el carácter Kondo del sistema (la temperatura Kondo está asociada a un “*crossover*” en donde va desapareciendo el efecto Kondo), las correlaciones AFM ligadas al efecto Kondo y el carácter *heavy Fermion* del sistema van desapareciendo. Finalmente en la octava figura se obtiene un mapa de contorno de ARPES correspondiente a electrones de conducción con una superficie de Fermi *small*, seguramente las fluctuaciones térmicas altas deslocalizan los electrones inicialmente localizados y generan una superficie de Fermi asociada a electrones de conducción no interactuantes.

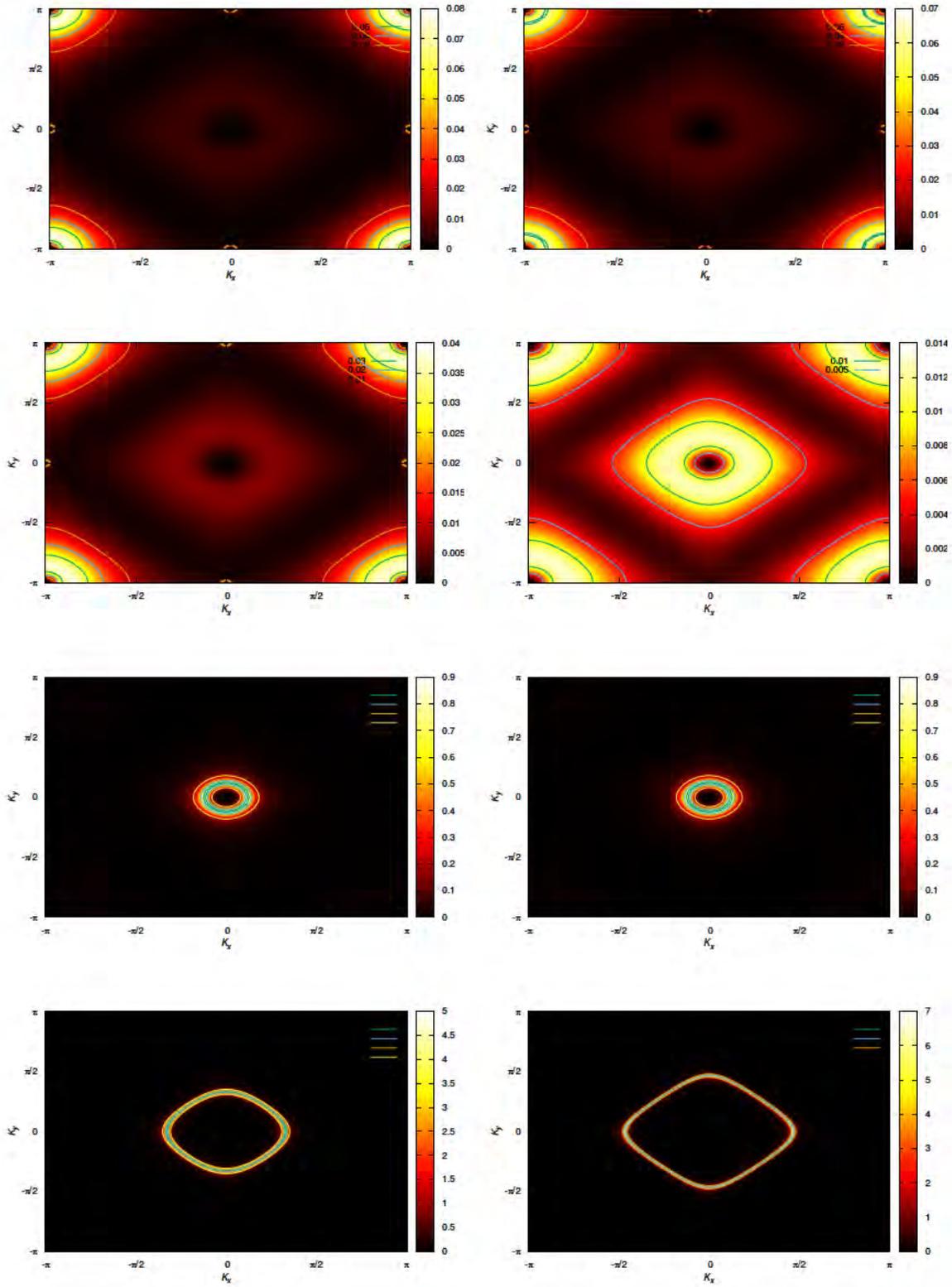


Figura 4.10.: Evolución en temperatura de la señal de ARPES, usando el modelo de *X-boson* para un AKT con fuertes correlaciones entre estados *f*. Las temperaturas de arriba hacia abajo y de izquierda a derecha: $T = 1 \times 10^{-4}t$, $T = 5 \times 10^{-3}t$, $T = 1 \times 10^{-2}t$, $T = 2 \times 10^{-2}t$, $T = 3 \times 10^{-2}t$, $T = 0,1t$, $T = 0,2$, $T = 0,5t$ y $T = 1,0t$.

5. Estados superficiales o in-gap states en el SmB_6

En capítulos anteriores se ha descrito la física de un aislante Kondo topológico a bajas temperaturas con fuertes correlaciones, además de una marcada hibridización dependiente de la interacción espín-órbita $V(\mathbf{k})$ y una interacción de corto alcance a primeros vecinos de estados localizados f . Todo esto demarcado en el modelo periódico de Anderson y cuyo paradigma experimental se encuentra centrado en el SmB_6 ^{1,10,15,44,123}.

En este capítulo se estudia el papel de la representación Γ_8^1 en la formación de los estados dentro del *gap* en el estado topológico (*in-gap states*). Estos estados son conocidos en sistemas como el SmB_6 , el $FeSi$ ¹²⁴ y YbB_{12} ¹²⁵ los cuales presentan características de aislantes Kondo. Los *in-gap states* pueden ser una propiedad intrínseca o pueden surgir debido a los defectos de la red con una pequeña pero finita densidad de estados dentro del *gap* de hibridización con fuerte dependencia con la presión y tienden a desaparecer en presencia de altos campos magnéticos¹²⁶. Como se evidencia en resultados experimentales¹² por debajo de $6K$ la conductancia residual se debe a estos *in-gap states*. Algunos modelos se han desarrollado para describir estos estados como el de Riseborough (2003), en el cual se propone que los estados *in-gap* surgen de correlaciones antiferromagnéticas¹²⁷. En este capítulo se discuten las propiedades térmicas como el calor específico y el coeficiente γ a bajas temperaturas con una buena aproximación a los resultados experimentales.

5.1. Modelo para in-gap states.

Nuevamente usando el tratamiento de X -boson para el modelo de Anderson periódico en el límite de fuertes correlaciones electrónicas $U = \infty$, con la doble ocupación proyectada fuera del espacio de Hilbert para los estados localizados usando los operadores de Hubbard el hamiltoniano es el ya usado en la ecuación (3.12) con los mismos parámetros para las respectivas energías.

Para investigar las propiedades de líquido de Fermi de las funciones de Green en el presente tratamiento se consideran las autoenergías correspondientes a los electrones f y c ($\sum_f(\mathbf{k}, z)$ y $\sum_c(\mathbf{k}, z)$)⁷⁴. Estas cantidades se relacionan con las funciones de Green exactas por medio de las ecuaciones

$$G_{\mathbf{k}\sigma,\alpha}^{ff}(z_n) = [z_n - \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}^f - \sum_f(\mathbf{k}, z)]^{-1} \quad (5.1)$$

$$G_{\mathbf{k}\sigma,\alpha}^{cc}(z_n) = [z_n - \varepsilon_{\mathbf{k},\sigma} - \sum_c(\mathbf{k}, z)]^{-1} \quad (5.2)$$

comparando las funciones de Green obtenidas con anterioridad en (2.4) y (2.5) con las ecuaciones (5.1) y (5.2) se obtiene las respectivas autoenergías

$$\sum_f(\mathbf{k}, z) = \left(z_n \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}^f\right) \left(1 - \frac{1}{D_\alpha}\right) - \frac{|V_{\sigma\alpha}(\mathbf{k})|^2}{(z_n - \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma})} \quad (5.3)$$

$$\sum_c(\mathbf{k}, z) = \frac{|V_{\sigma\alpha}(\mathbf{k})|^2 D_\alpha}{(z_n - \varepsilon_{\mathbf{k}}^f)}. \quad (5.4)$$

(5.3), (5.4) Teniendo en cuenta que la hibridización se desvanece en los puntos de alta simetría de la primera zona de Brillouin $\Gamma := [0, 0]$, y $X := [0, \pm\pi], [\pm\pi, 0]$ y $M = [\pm\pi, \pm\pi]$ (con $a = 1$: parámetro de red).

Los electrones de conducción y los electrones correlacionados se desacoplan en esos puntos de simetría donde las funciones de Green recobran su expresión de orden cero

$$G_{\mathbf{k}\sigma,\alpha}^{ff}(z_n) = \frac{-1}{z_n - \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}^f}, \quad (5.5)$$

$$G_{\mathbf{k}\sigma,\alpha}^{cc}(z_n) = \frac{-1}{z_n - \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}} \quad (5.6)$$

en el punto de simetría X la energía es $\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}^f = \varepsilon_{f,\alpha} + \Lambda$, mientras en los punto Γ y M , $\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}^f = \varepsilon_{f,\alpha} + \Lambda \pm 2tD_\alpha \langle X_{i\alpha,j\alpha}^\dagger X_{i\alpha,j\alpha} \rangle$ respectivamente. En la figura 5.1 se muestran los diagramas de contorno de los valores absolutos de las autoenergías f y c como función de k_x y k_y en la zona de Brillouin. Los resultados muestran que alrededor del punto de alta simetría X la hibridización se desvanece (ocurre de forma similar en los puntos de simetría Γ y M) ratificando el desacople entre los electrones f y c como se muestra en las ecuaciones (5.5) y (5.6) como se mostrará más adelante, el desacople de las funciones de Green en los puntos de alta simetría pueden originar los estados *in-gap* en el SmB_6 es su fase topológica.

Los parámetros R y Λ del modelo X -boson son dados por la relación de completez (ec. 3.9)

$$R = 1 - \sum_\alpha X_{\alpha,\alpha}, \quad (5.7)$$

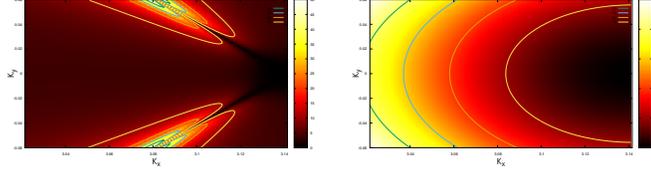


Figura 5.1.: Diagrama de contorno ARPES de los valores absolutos de las autoenergías f y c alrededor del punto de simetría X como función de k_x y k_y en la zona de Brillouin.

y

$$\Lambda = \frac{-1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x dk_y \left\{ \bar{E}_{\mathbf{k}\alpha} \mathcal{F}_{\mathbf{k}\sigma,\alpha}^+ + \frac{[2V^2 \Delta^2(\mathbf{k}) + \bar{E}_{\mathbf{k}\alpha} (\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}^f - \varepsilon_{\mathbf{k},\sigma})] \mathcal{F}_{\mathbf{k}\sigma,\alpha}^-}{\sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}^f)^2 + 4V^2 D_\alpha \Delta^2(\mathbf{k})}} \right\}, \quad (5.8)$$

donde $\mathcal{F}_{\mathbf{k}\sigma,\alpha}^+ = n_F(\omega_{\mathbf{k}}^{(+)}) + n_F(\omega_{\mathbf{k}}^{(-)})$ y $\mathcal{F}_{\mathbf{k}\sigma,\alpha}^- = n_F(\omega_{\mathbf{k}}^{(+)}) - n_F(\omega_{\mathbf{k}}^{(-)})$.

Después del cálculo numérico del parámetro Λ , se calcula la ocupación del estado localizado (n_f) y la ocupación de los estados de conducción (n_c),

$$n_{f,c} = \left(\frac{-1}{\pi} \right) \text{Im} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega n_F(\omega) \times \left(\frac{1}{4\pi^2} \right) \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x dk_y G_{\mathbf{k}\sigma,\alpha}^{f,c}(\omega). \quad (5.9)$$

con estos resultados se calcula el número total de partículas $N_t = 2(n_f + n_c)$, el cual se mantiene constante durante todos los cálculos autoconsistentes, mientras el potencial químico μ varía libremente. Todos los cálculos son repetidos hasta la convergencia de la función de correlación antiferromagnética (SRAFC) $\langle X_{i\alpha}^\dagger X_{j\alpha} \rangle$ y los nuevos parámetros Λ y R son obtenidos.

La densidad de estados es obtenida numéricamente a través de las funciones de Green del modelo *X-boson* 2.4,2.5 y 2.6

$$\rho^{f,c}(\omega_{\mathbf{k}}(\pm)) = \left(\frac{-1}{4\pi^3} \right) \Im \int_{-\pi}^{\pi} dk_x \int_{-\pi}^{\pi} dk_y G_{\mathbf{k}\sigma,\alpha}^{f,c}(\omega), \quad (5.10)$$

donde el valor $\omega_{\mathbf{k}}(\pm)$ es dado por

$$\omega_{\mathbf{k}\sigma,\alpha}^\pm = \frac{1}{2} (\varepsilon_{\mathbf{k},\sigma} + \varepsilon_{\mathbf{k},\alpha}^f) \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{k},\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k},\alpha}^f)^2 + 4|V|^2 D_\alpha \Delta^2(\mathbf{k})}. \quad (5.11)$$

5.2. Espectroscopia de fotoemisión de resolución angular para los *in-gap states*

En todos los cálculos se considero el siguiente conjunto de parámetros: la energía del estado localizado $E_f = -0,912t$ con el número de ocupación total fijo en $N_t = 1,6667$, la interacción antiferromagnética $J_H = -0,10t$ y el coeficiente de la hibridización $V = 0,5t$.

El espectro de baja energía de fotoemisión (PES) es calculado empleando la relación^{128,129}

$$I_-(\omega, T) = \left(\frac{1}{4\pi^2} \right) \int_{-\pi}^{\pi} dk_x \int_{-\pi}^{\pi} dk_y n_F(\omega, T) \times |V(\mathbf{k}_x, \mathbf{k}_y)|^2 G_{\mathbf{k}\sigma, \alpha}(\omega), \quad (5.12)$$

donde la función espectral

$$G_{\mathbf{k}\sigma, \alpha}(\omega) = \left(\frac{-1}{\pi} \right) \Im \{ G_{\mathbf{k}\sigma, \alpha}^{ff}(z) + G_{\mathbf{k}\sigma, \alpha}^{cc}(z) \}, \quad (5.13)$$

incluye todas las funciones de Green asociadas a los procesos vinculados a la conducción y los estados localizados. Los electrones f son localizados en altas temperaturas, pero a medida que la temperatura disminuye su hibridización con los electrones de conducción (c) llevan a una reconstrucción de la superficie de Fermi con la formación de bandas de conducción de fermiones pesados¹³⁰. El proceso inverso a PES es IPES, y es usado para investigar los estados no ocupados y esta definido por la relación

$$I_+(\omega, T) = \left(\frac{1}{4\pi^2} \right) \int_{-\pi}^{\pi} dk_x \int_{-\pi}^{\pi} dk_y (1 - n_F(\omega, T)) \times |V(\mathbf{k}_x, \mathbf{k}_y)|^2 G_{\mathbf{k}\sigma, \alpha}(\omega). \quad (5.14)$$

El espectro de fotoemisión resuelto en ángulo ARPES corresponde al integrando de la ecuación 5.12

$$ARPES = n_F(\omega, T) |V(\mathbf{k}_x, \mathbf{k}_y)|^2 G_{\mathbf{k}\sigma, \alpha}(\omega). \quad (5.15)$$

con

$$V(\mathbf{k}_x, \mathbf{k}_y) = |V_{\sigma\alpha}(\mathbf{k})|^2 = 4D_{\sigma} |V|^2 [\sin^2(k_x) + \sin^2(k_y)] \quad (5.16)$$

También es posible calcular la respuesta de conductancia diferencial de tunelamiento de barrido $dI(V)/dV$, en el límite de débil tunelamiento $t_c, t_f \rightarrow 0$ ¹³¹

$$\frac{dI(V)}{dV} = \frac{2\pi e}{\hbar} \rho_{tip} [t_c^2 \rho_c(V) + t_f^2 \rho_f(V) + 2t_c t_f \rho_{cf}(V)] \quad (5.17)$$

con las densidades de estados ρ_{tip} , ρ_c y ρ_f de la punta, de los electrones de conducción y de los estados localizados respectivamente. El último término en la ecuación 5.17 describe los

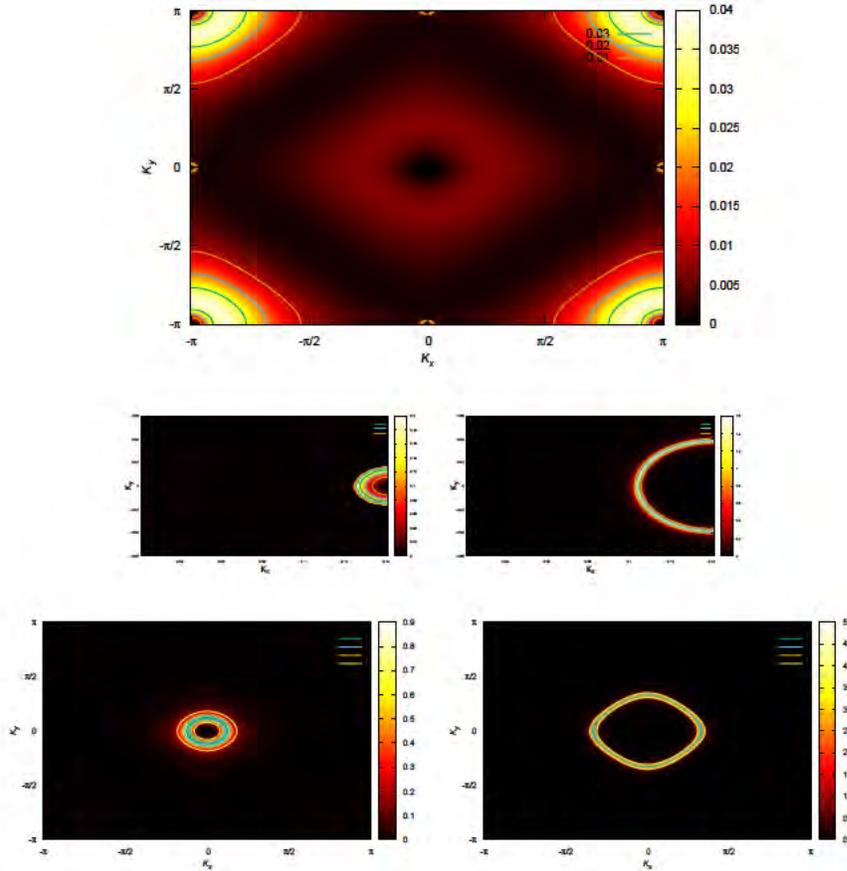


Figura 5.2.: Diagramas de ARPES para diferentes regímenes de temperatura del aislante Kondo topológico SmB_6 .

procesos de interferencia cuántica entre los dos caminos de tunelamiento de los electrones de conducción y de los electrones localizados.

En la figura 5.2 se encuentran los resultados para la densidad espectral como una función de k_x y k_y en la zona de Brillouin. En el panel superior, se encuentran los resultados ARPES para bajas temperaturas $T = 0,01t$ (como se calculó en 4.2.1), donde la reconstrucción de la superficie de Fermi es completa, con los electrones f y c actúan como electrones de conducción “pesados” formando una superficie de Fermi “larga”¹³². En el panel de en medio a la izquierda se muestra en detalle de la señal del cono de Dirac alrededor del punto X , y a la derecha del mismo panel se muestra el desarrollo del cono de Dirac por debajo de la superficie de Fermi. En el panel inferior a la izquierda se muestran los resultados de ARPES correspondientes a la transición de temperatura donde ocurre el paso de mal-metal a aislante Kondo $T \simeq 0,2t$. En el panel inferior a la derecha se dibuja la respuesta de ARPES para alta temperatura $T = 0,5t$, donde se nota una superficie de Fermi pequeña, característica de

los electrones de conducción únicamente, como un resultado de desacoplar los canales de los electrones de conducción y electrones localizados.

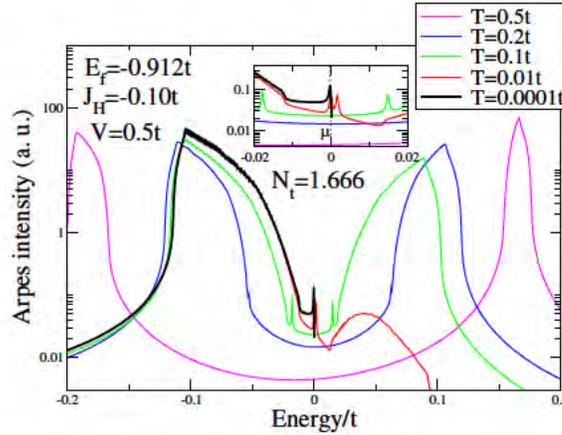


Figura 5.3.: Intensidad espectral parcialmente integrada en momentum ARPES alrededor del punto X , para varias temperaturas, de la ventana del panel de en medio de la figura 5.2 como función de la energía.

En la figura 5.3 se muestra la intensidad del momentum parcialmente integrado de la señal de ARPES alrededor del punto de simetría X ¹⁵ del panel de en medio de la figura 5.2 como función de la energía. Para empezar la discusión se considera los resultados de altas temperaturas $T = 0,5t$ y $T \simeq 0,2t$, donde ocurre la transición a aislante Kondo topológica. En ambos casos la intensidad de ARPES exhibe dos picos bien separados que se van acercando a medida que la temperatura disminuye. Por debajo de la transición, en $T = 0,1t$, la separación entre los picos disminuye ubicándose en el borde del *gap*, aquí podemos identificar el inicio de la formación de los estados *in-gap*. Cuando la temperatura es $T = 0,01t$ los estados *in-gap* se ubican en la vecindad del potencial químico μ y si la temperatura es más baja, alrededor de $T = 0,0001t$, la distribución de Fermi corta la intensidad espectral en el potencial químico obteniendo un pico en el nivel de Fermi dando lugar a los estados *in-gap*. Como se mostrará en la siguiente sección, estos estados son los responsables de incrementar el valor del calor específico a bajas temperaturas. Los resultados obtenidos son consistentes con resultados experimentales de Neupane *et al.* (2013)¹⁵.

En la figura 5.4 se muestran los resultados para la intensidad de ARPES parcialmente integrada en momentum alrededor del punto de alta simetría Γ , para diferentes valores de temperatura, en una ventana definida en un intervalo $k_x \times k_y [-0.05t, 0.05t]$ como una función de la energía. Contrario al punto de simetría X son los puntos donde aparece el cono de Dirac y genera los estados *in-gap*, en Γ solamente produce efectos relevantes en la transición a donde el pico aislante Kondo topológico en ($T \simeq 0,2t$), donde el pico atraviesa el potencial químico. Este pico es asociado a la desaparición de la hibridización en el punto Γ . A medida

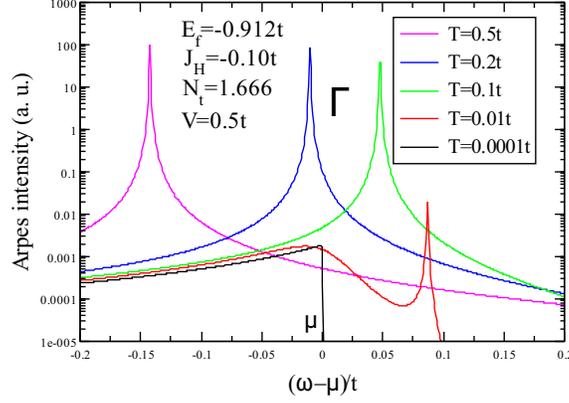


Figura 5.4.: Intensidad espectral de ARPES parcialmente integrada en momentum alrededor del punto de simetría Γ para diferentes valores de temperatura.

que disminuye la temperatura el pico sufre un desplazamiento hacia la derecha y cuando la temperatura es demasiado baja desaparece bajo la influencia de la distribución de Fermi y no tiene efectos en la aparición de los estados *in-gap*.

En la figura 5.5 se muestra la conductancia diferencial en función del voltaje *bias* y el correspondiente aporte de electrones de conducción c , electrones localizados f y la suma $c + f$. De los resultados es posible visualizar una simetría para los valores de $\pm \Delta V/t$ alrededor de $\Delta V = 0,0t$ con un aumento lineal en $|\Delta V/t|$ hasta $\pm 0,08$ en todas las contribuciones c , f y $c + f$. El aporte lineal pertenece a los estados superficiales y el salto en la conductancia diferencial corresponde a una característica propia del *bulk* la leve asimetría es atribuida a un posible efecto de interferencia cuántica de la forma del efecto Fano en un sistema Kondo¹³¹.

5.3. Calor específico

En esta sección se discuten los efectos de los estados *in-gap* en el calor específico del SmB_6 . En un reciente trabajo Hartstein *et al.* (2017)¹³³ midió el calor específico del un *single crystal* de SmB_6 a temperaturas por debajo de 63mK, y obtuvo un coeficiente lineal de calor específico γ a bajas temperaturas con un incremento en el paso aproximadamente de 1,0mK, similar a trabajos anteriores¹³⁴. También midieron la conductividad térmica en la misma región del calor específico y obtuvieron una llamativa dependencia con el campo magnético. Estos resultados fueron atribuidos a la existencia de excitaciones itinerantes dentro del *gap* a bajas temperatura únicamente.

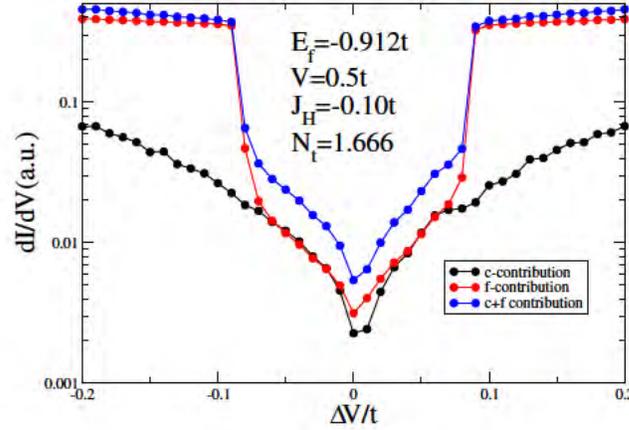


Figura 5.5.: Conductancia diferencial para los electrones de conducción (*c*), localizados (*f*) y la suma de los dos electrones como una función del voltaje *bias* ΔV . Los parámetros empleados en el cálculo son: la energía de los estados localizados $E_f = -0,912t$ con número de ocupación fijado en $N_t = 1,6667$, la interacción antiferromagnética de corto alcance $J_H = -0,10t$ y el valor de la hibridización desnuda (sin dependencia en k) $V_o = 0,5t$.

Para calcular el calor específico se emplea la relación de Sommerfeld

$$C_v = \frac{\pi^2}{3} k_B T (\rho_c + \rho_f) \quad (5.18)$$

$$\gamma = \frac{C_v}{T} \quad (5.19)$$

donde, k_B es la constante de Boltzman y ρ_c , ρ_f son las densidades de los electrones de conducción y localizados respectivamente.

En la figura 5.6 se muestran los resultados para la densidad de estados de los electrones de conducción y electrones localizados alrededor del *gap* topológico. Para altas temperaturas ($T = 1,0t$), el *gap* está completamente cerrado para ambos tipos de electrones (*f* y *c*) y el sistema es por consiguiente un metal; en temperaturas intermedias ($T = 0,1t$), el *gap* abre para los electrones de conducción, mientras que para los estados localizados aparece un *gap* por debajo del potencial químico, pero en $\mu = 0$, ρ_f es alto y el sistema mantiene su estado metálico. Finalmente, a bajas temperaturas aparece un pico en la densidad de estados en $\mu = 0$, para ambos canales de electrones de conducción y localizados, esto se debe a la formación de estados dentro del *gap* topológico.

La figura 5.7 muestra la evolución en temperatura de las funciones de correlación: La función de correlación Kondo, $\langle X_{i\alpha}^\dagger c_{k\sigma} \rangle$ es prácticamente plana revelando la baja intensidad de

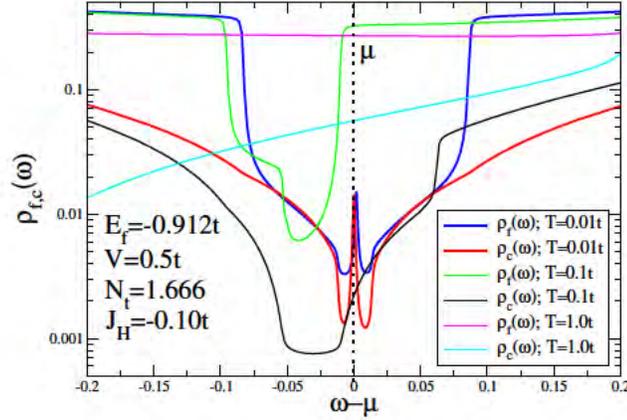


Figura 5.6.: Densidad de estados para los electrones de conducción y electrones localizados alrededor del *gap* topológico para diferentes temperaturas.

dispersión Kondo (*spin-flip*), característica del régimen de fluctuación de valencia. Por otro lado, la función de correlación antiferromagnética de corto alcance (SRAFC) $\langle X_{i\alpha}^\dagger X_{j\alpha} \rangle$, varía fuertemente con la temperatura revelando que la apertura del *gap* topológico es controlada por este tipo de interacción. Finalmente, el potencial químico tiende a cero para bajas temperaturas. La figura 5.8 presenta los resultados para el calor específico lineal con hibridización constante $V = 0,5t$ y su dependencia en \vec{k} dada por la ecuación 5.16. Para la hibridización constante, el calor específico decrece monótonicamente como decrece la temperatura y el coeficiente γ tiende a un valor constante muy bajo. Por otro parte, debido al desarrollo de los estados *in-gap* del *gap* topológico, el calor específico exhibe un incremento al disminuir la temperatura, y el coeficiente γ tiende a un valor constante más alto que en el caso anterior, lo que indica un aumento de la masa efectiva de los portadores. Esto es razonable, una vez que los estados *in-gap* se forman por los electrones de conducción y los electrones localizados asociados a una condición Kondo, que incrementa la masa efectiva de los portadores de carga. También se calculan la densidad de estados en el potencial químico-nivel de Fermi ($\mu = 0$) para los electrones de conducción y localizados, es evidente que hay un aumento de los valores de las densidades de estados “siguiendo” el comportamiento expuesto por el calor específico y el coeficiente γ .

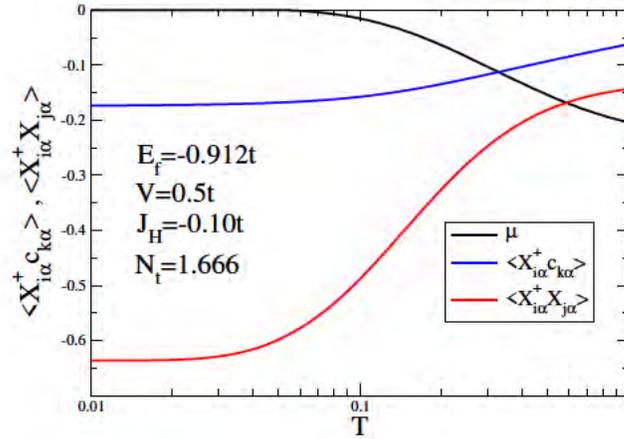


Figura 5.7.: La función de correlación Kondo, $\langle X_{i\alpha}^\dagger c_{k\sigma} \rangle$, la función de correlación antiferromagnética de corto alcance (SRAFC) $\langle X_{i\alpha}^\dagger X_{j\alpha} \rangle$ y el potencial químico μ como función de la temperatura.

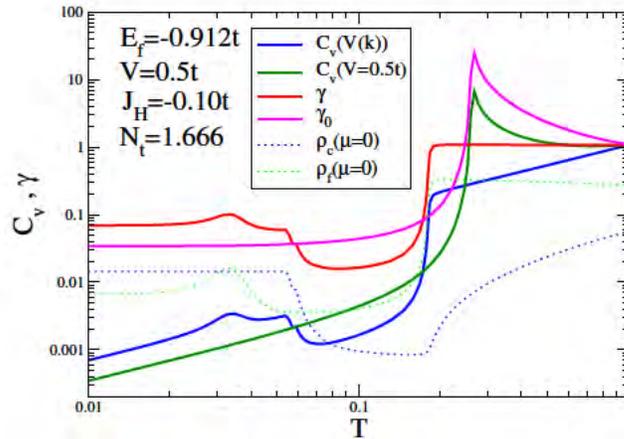


Figura 5.8.: Calor específico lineal considerando la hibridización constante $V = 0,5t$ y su dependencia en \vec{k} ; el coeficiente lineal del calor específico γ y la densidad de los electrones f y c en el potencial químico como una función de la temperatura.

6. Estudio de estados in-gap de Aislantes Kondo Topológicos usando el Modelo Atómico

En este capítulo se desarrolla el modelo atómico periódico implementando la topología para un sistema de aislante Kondo en dos dimensiones. Este modelo emplea la solución atómica para el modelo de Anderson desarrollado con anterioridad tanto para el problema de la impureza como para el modelo periódico¹³⁵. Se ha mostrado que el modelo atómico captura la física relevante de las fuertes pero finitas correlaciones a bajas energías de sistemas de baja dimensionalidad como puntos cuánticos, nanotubos y nanohilos, como también en sistemas periódicos de aislantes Kondo^{69,135,70,136,137}. En el capítulo anterior se obtuvieron resultados de los estados *in-gap* usando el modelo de *X-boson* el cual es una aproximación de campo medio con correlación infinita, que a pesar de su “simplicidad” nos permite obtener resultados aproximados importantes que contrastan con los resultados experimentales tanto en las propiedades termoeléctricas como en las ópticas. En particular las propiedades de los estados *in-gap* presentes en el SmB_6 a muy bajas temperaturas donde se presentan estados superficiales en un sistema aislante fuertemente correlacionado. Aquí pretendemos estudiar los efectos de estos estados *in-gap* en la densidad de estados y el espectro de fotoemisión usando el modelo atómico con una correlación finita.

El modelo atómico para aislantes Kondo, sigue el formalismo de la aproximación atómica para solucionar el modelo de Anderson periódico desarrollado a lo largo de los últimos diez años¹³⁸ y aplicado tanto al modelo de la impureza^{139,60,140,141}, como para el modelo de la red de Anderson⁷⁰. En esta formulación se tiene la ventaja de hacer una descripción tipo *many-body* con una interacción coulombiana finita, presentando una descripción más cercana a la real, comparada con otros métodos tipo campo medio como es el caso de *slave-boson*⁸⁸, *X-boson*, *Hartree-Fock* y *Hubbard*⁷³ (ver apéndice C). El caso de una única impureza de Anderson tiene solución exacta numéricamente vía *NRG Numerical Renormalization Group Theory*^{142,143} y *ansatz* de Bethe¹⁴⁴, el primero de estos métodos tiene un costo computacional alto y el segundo tiene un carácter analítico pero de difícil implementación. Resultados obtenidos para las propiedades termoeléctricas de un punto cuántico acoplado un canal de

conducción empleando el método atómico^{145,60,140,146} presentan una muy alta similitud con los obtenidos por NRG^{128,142}. El modelo de la red de Anderson no tiene solución exacta, de forma que el empleo de un método con carácter *many-body* para tratarlo -el método atómico para la red de Anderson-, basado en un tratamiento que reproduce buena parte de los resultados obtenidos para el caso de la impureza (el método atómico para la impureza de Anderson), nos permite introducir una alternativa para estudiar sistemas fuertemente correlacionados, con correlación finita, topología y un carácter *many-body*.

El modelo de Anderson describe la hibridización entre estados localizados f y electrones de conducción c por el cuál estas intercambian energía, además de sus energías respectivas de partícula libre y una repulsión coulombiana en el estado localizado. En el método atómico se considera que existe un colapso de la banda de conducción, de manera que se tiene un único nivel atómico acoplado vía hibridización a un estado localizado, en esta condición límite el hamiltoniano puede ser diagonalizado de manera exacta y analítica, las funciones de Green (FG) asociadas al sistema se obtienen exactamente; al trabajar con operadores de Hubbard, se emplea el formalismo de Zubarev para las FG, en donde todas las correlaciones en el sistema se incorporan en el denominado cumulante asociado a una determinada FG, que se expresa en una ecuación tipo Dyson para las mismas; la ecuación de Dyson asociada al problema “real”, es decir cuando no se colapsa la banda de conducción en un único nivel, tiene la misma forma que la ecuación de Dyson para el caso del límite atómico, pero con un cumulante asociado en principio desconocido (el cumulante “exacto” es desconocido); la hipótesis central del método atómico es asumir que la dependencia funcional del cumulante desconocido para las FG tiene la misma “forma” (dependencia funcional- “formula matemática”) que la del cumulante obtenido en el límite “atómico”; se debe determinar en que valor se “colapsa” la banda de conducción, este es obtenido numéricamente minimizando el valor esperado de la energía y exigiendo que se satisfaga la regla de suma de Friedel (RSF) (las dos condiciones simultáneamente), la satisfacción de la RSF asegura que los principios de conservación sean satisfechos en el proceso de dispersión mecánico cuántico asociado al modelo.

En esta aproximación el cumulante efectivo del problema de un solo electrón tiene solución exacta⁷⁰, y es reemplazado en el problema de varios electrones. En este tratamiento es posible calcular una función de Green de forma analítica y es semejante a tener la solución de una colección hamiltonianos de átomos independientes en cada sitio. En cada uno de los sitios es posible tener un máximo de cuatro electrones: dos electrones en el estado localizado y dos en el estado de los electrones de conducción. Los estados localizados f tienen cuatro posibles estados $|0\rangle$ (vacío), $|+\rangle$ (con un electrón con espín *up*) $|-\rangle$ (otro con espín *down*) y el estado $|d\rangle$ de doble ocupación. De igual forma para los electrones de conducción ($|0\rangle, |\uparrow\rangle, | \rangle, |\uparrow\downarrow\rangle$) con ellos se forma una base de dieciséis estados que generan la diagramática necesaria de la

física de un aislante Kondo.

Las funciones de Green forman una matriz

$$G_{\mathbf{k},\sigma}^{ff} = \begin{pmatrix} G_{\uparrow}^{ff} & 0 \\ 0 & G_{\downarrow}^{ff} \end{pmatrix} \quad (6.1)$$

cada función de Green es descrita por

$$G_{\mathbf{k},\sigma}^{ff} = \mathbf{M}_{\sigma} \cdot (\mathbf{I} - \mathbf{A}_{\sigma})^{-1} \quad (6.2)$$

donde $\mathbf{A}_{\sigma} = \mathbf{W}_{\sigma} \cdot \mathbf{M}_{\sigma}$ y \mathbf{M}_{σ} es la matriz de cumulantes descrita por

$$\mathbf{M}_{\sigma} = (\mathbf{I} + G_{\sigma}^{ff} \cdot \mathbf{W}_{\sigma})^{-1} \cdot \mathbf{G}_{\sigma}^{ff} \quad (6.3)$$

con $\mathbf{W}_{\sigma} = \mathbf{W}_{\uparrow}, \mathbf{W}_{\downarrow}$ definidas como

$$\mathbf{W}_{\uparrow}(\mathbf{k}, z) = |V|^2 g_{c,\uparrow}^0(\mathbf{k}, z) \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (6.4)$$

$$\mathbf{W}_{\downarrow}(\mathbf{k}, z) = |V|^2 g_{c,\downarrow}^0(\mathbf{k}, z) \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \quad (6.5)$$

y

$$g_{c,\sigma}^0(\mathbf{k}, z) = \frac{-1}{z - \varepsilon(\mathbf{k}, z)}, \quad (6.6)$$

$z = i\omega$. La matriz \mathbf{M}_{σ} está definida por los cumulantes

$$\mathbf{M}_{\uparrow} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{13} \\ m_{31} & m_{33} \end{pmatrix} \quad (6.7)$$

$$\mathbf{M}_{\downarrow} = \begin{pmatrix} m_{22} & m_{24} \\ m_{42} & m_{44} \end{pmatrix} \quad (6.8)$$

usando las definiciones para las funciones de Green exactas \mathbf{G}_{σ}^{ff} para los estados localizados y reemplazando en la matriz (6.1) los respectivos valores de las relaciones (6.3-6.8)

$$\mathbf{G}_{\uparrow}^{ff} = \frac{\begin{pmatrix} m_{11} & m_{13} \\ m_{31} & m_{33} \end{pmatrix} - |V|^2 \varphi_{\uparrow}(i\omega)(m_{11}m_{33} - m_{13}m_{31}) \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}}{1 - |V|^2 \varphi_{\uparrow}(i\omega)(m_{11} + m_{33} + m_{13} + m_{31})} \quad (6.9)$$

$$\mathbf{G}_{\downarrow}^{ff} = \frac{\begin{pmatrix} m_{22} & m_{24} \\ m_{42} & m_{44} \end{pmatrix} - |V|^2 \varphi_{\downarrow}(i\omega)(m_{22}m_{44} - m_{24}m_{42}) \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}}{1 - |V|^2 \varphi_{\downarrow}(i\omega)(m_{22} + m_{44} + m_{24} + m_{42})} \quad (6.10)$$

y de forma análoga es posible encontrar las funciones de Green para los electrones de conducción $\mathbf{G}_\sigma^{cc}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', i\omega)$ y las funciones de Green cruzadas $\mathbf{G}_\sigma^{cf}(\mathbf{k}, i\omega)$ cuyos resultados son

$$\mathbf{G}_\uparrow^{cc}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', i\omega) = g_c^0(\mathbf{k}, i\omega)\delta(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + \frac{|V|^2}{N_s}g_{c,\uparrow}^0(\mathbf{k}, i\omega) \times \frac{(m_{11} + m_{33} + m_{13} + m_{31})}{1 - |V|^2\varphi_\uparrow(i\omega)(m_{11} + m_{33} + m_{13} + m_{31})} \times g_{c,\uparrow}^0(\mathbf{k}', i\omega) \quad (6.11)$$

$$\mathbf{G}_\downarrow^{cc}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', i\omega) = g_c^0(\mathbf{k}, i\omega)\delta(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + \frac{|V|^2}{N_s}g_{c,\downarrow}^0(\mathbf{k}, i\omega) \times \frac{(m_{22} + m_{44} + m_{24} + m_{42})}{1 - |V|^2\varphi_\downarrow(i\omega)(m_{22} + m_{44} + m_{24} + m_{42})} \times g_{c,\downarrow}^0(\mathbf{k}', i\omega) \quad (6.12)$$

$$\mathbf{G}_\uparrow^{cf}(\mathbf{k}, i\omega) = \frac{V}{\sqrt{N_s}}g_{c,\uparrow}^0(\mathbf{k}, i\omega) \times \frac{(m_{11} + m_{33} + m_{13} + m_{31})}{1 - |V|^2\varphi_\uparrow(i\omega)(m_{11} + m_{33} + m_{13} + m_{31})} \quad (6.13)$$

$$\mathbf{G}_\downarrow^{cf}(\mathbf{k}, i\omega) = \frac{V}{\sqrt{N_s}}g_{c,\downarrow}^0(\mathbf{k}, i\omega) \times \frac{(m_{22} + m_{44} + m_{24} + m_{42})}{1 - |V|^2\varphi_\downarrow(i\omega)(m_{22} + m_{44} + m_{24} + m_{42})} \quad (6.14)$$

La aproximación atómica consiste en calcular los cumulantes efectivos en la aproximación atómica correspondientes al modelo en la solución exacta de tal forma que la función de Green atómica queda descrita en términos de estos cumulantes aproximados

$$\mathbf{G}_\sigma^{ff,at} = \mathbf{M}_\sigma^{at} \cdot (\mathbf{I} - \mathbf{W}_\sigma^0 \mathbf{M}_\sigma^{at})^{-1} \quad (6.15)$$

y los cumulantes aproximados

$$\mathbf{M}_\sigma^{at} = (\mathbf{I} + \mathbf{G}_\sigma^{ff,at} \cdot \mathbf{W}_\sigma^0 \mathbf{M}_\sigma^{at}) \cdot \mathbf{G}_\sigma^{ff,at} \quad (6.16)$$

la ecuaciones (6.3) y (6.5) evaluadas en el origen son definidas por

$$\mathbf{W}_\uparrow^0(z) = |\Delta|^2\varphi_\uparrow(z) \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (6.17)$$

$$\mathbf{W}_\downarrow^0(z) = |\Delta|^2\varphi_\downarrow(z) \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (6.18)$$

Aquí los valores para el nivel de electrones de conducción se sobre estima en el valor de energía ε_0 al cual se colapso la banda. Para compensar el efecto del colapso se reemplaza el valor de la hibridización $V \rightarrow \Delta$ que depende del ancho de banda del sistema sin colapsar,

$\Delta^2 = \frac{\pi V^2}{2D}$ llamado parámetro de Anderson que se intercambia más adelante por el valor de la hibridización del sistema con topología. La función $\varphi_\sigma^0(z)$

$$\varphi_\sigma^0(z) = \frac{-1}{z - \varepsilon_0 - \mu} \quad (6.19)$$

$\varphi_\sigma^0(z)$ es la función de Green no perturbada con la banda de conducción de ancho cero, localizada en ε_0 , donde el potencial químico μ se ha restado a la energía de los electrones de conducción $E_{\mathbf{k},\sigma} - \mu$ en $g_{c,\sigma}^0(\mathbf{k}, z)$ en (6.6). Después se calcula el cumulante atómico (6.16) teniendo en cuenta los valores de (6.17) y (6.18). De este calculo se obtienen M_\uparrow^{at} y M_\downarrow^{at}

$$M_\uparrow^{at} = \frac{\begin{pmatrix} g_{11} & g_{13} \\ g_{31} & g_{33} \end{pmatrix} + |\Delta|^2 \varphi_\uparrow^0(i\omega)(g_{11}g_{33} - g_{13}g_{31}) \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}}{1 - |\Delta|^2 \varphi_\uparrow^0(i\omega)(g_{11} + g_{33} + g_{13} + g_{31})} \quad (6.20)$$

$$M_\downarrow^{at} = \frac{\begin{pmatrix} g_{22} & g_{24} \\ g_{42} & g_{44} \end{pmatrix} + |\Delta|^2 \varphi_\downarrow^0(i\omega)(g_{22}g_{44} - g_{24}g_{42}) \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}}{1 - |\Delta|^2 \varphi_\downarrow^0(i\omega)(g_{22} + g_{44} + g_{24} + g_{42})} \quad (6.21)$$

reemplazando los cumulantes aproximados en las funciones de Green atómicas $\mathbf{G}_\sigma^{ff,at}$, $\mathbf{G}_\sigma^{cc,at}$ y $\mathbf{G}_\sigma^{fc,at}$ según la ecuación (6.2). La función de Green periódica se obtiene considerando una banda de conducción cuadrada

$$G_\sigma^{ff}(i\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} G_\sigma^{ff}(\mathbf{k}, i\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} G_\sigma^{ff}(\varepsilon_{\mathbf{k}}, i\omega) \quad (6.22)$$

cambiando al espacio continuo

$$G_\sigma^{ff}(i\omega) = \frac{1}{2D} \int_{-(D-\mu)}^{(D-\mu)} d\varepsilon G_\sigma^{ff}(\varepsilon, i\omega) \quad (6.23)$$

donde D es el medio ancho de banda. Las funciones de green para el modelo periódico de Anderson en la aproximación atómica

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_\uparrow^{ff} &= \frac{1}{2D} \int_{-(D-\mu)}^{(D-\mu)} d\varepsilon \frac{\begin{pmatrix} m_{11} & m_{13} \\ m_{31} & m_{33} \end{pmatrix} - |V|^2 \varphi_\uparrow(i\omega)(m_{11}m_{33} - m_{13}m_{31}) \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}}{1 - |V|^2 \varphi_\uparrow(i\omega)(m_{11} + m_{33} + m_{13} + m_{31})} \\ \mathbf{G}_\downarrow^{ff} &= \frac{1}{2D} \int_{-(D-\mu)}^{(D-\mu)} d\varepsilon \frac{\begin{pmatrix} m_{22} & m_{24} \\ m_{42} & m_{44} \end{pmatrix} - |V|^2 \varphi_\downarrow(i\omega)(m_{22}m_{44} - m_{24}m_{42}) \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}}{1 - |V|^2 \varphi_\downarrow(i\omega)(m_{22} + m_{44} + m_{24} + m_{42})} \end{aligned} \quad (6.24)$$

Estás funciones de Green atómicas son aproximadas y su diferencia con las funciones de Green exactas se encuentran en los valores de energía de los electrones de conducción $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ del cumulante efectivo $\mathbf{M}_{\sigma}^{eff}(z)$, mientras que en el modelo atómico el valor de los electrones de conducción en los cumulantes atómicos $\mathbf{M}_{\sigma}^{at}(z)$ este valor es ε_0 . A pesar de ser una aproximación $\mathbf{M}_{\sigma}^{at}(z)$ contiene todos los cumulantes de la solución exacta y por tanto se espera que las correspondientes funciones de Green de un valor muy parecido al realista. En principio para obtener ε_0 se minimiza la energía libre ($F = N_t\mu + \Omega$, Ω es el potencial termodinámico) para el caso de la impureza de Anderson, o se minimiza el valor esperado de la energía en el caso de la red, teniendo en cuenta la satisfacción de la regla de suma de Friedel

$$\rho_{f,\sigma} = \frac{\sin^2(n_{f,\sigma}\pi)}{\Delta\pi}, \quad (6.25)$$

la cual contiene la relación de todos los procesos de dispersión de los electrones de conducción, de los electrones localizados y el cambio en la fase del potencial químico¹⁴⁷. Además de satisfacer el número de ocupación

$$N_t = 2n_c + n_{f,\sigma} + n_{f,\bar{\sigma}} + n_{f,d} \quad (6.26)$$

donde n_c , $n_{f,\sigma}$, $n_{f,\bar{\sigma}}$ y $n_{f,d}$ son los números de ocupación de los electrones de conducción, de los estados localizados con espín *up*, *down* y de doble ocupación en el estado localizado, respectivamente.

6.0.1. Implementación de la topología en el modelo Atómico.

Las funciones de Green atómicas son calculadas a partir del colapso de la banda de conducción en un valor ε_0 el cual se encuentra auto consistentemente minimizando el valor esperado de la energía de la red y satisfaciendo la regla de suma de Friedel (6.25), manteniendo constante el número de ocupación en cada sitio de la red (6.26). Como describimos una situación en donde se “colapso” la banda de conducción en un único nivel energético ε_0 y consideramos el caso paramagnético, las FG asociadas se pueden escribir en términos de la autoenergía para los electrones de conducción $\Sigma_{c,\sigma}(\omega)$ y de la autoenergía para los electrones localizados $\Sigma_{f,\sigma}(\omega)$ como

$$G_{\sigma}^{cc}(z) = \frac{-1}{z - \varepsilon_0 - \Sigma_{c,\sigma}(\omega)} \quad (6.27)$$

y

$$G_{\sigma}^{ff}(z) = \frac{-1}{z - E_f - \Sigma_{f,\sigma}(\omega)}, \quad (6.28)$$

las FG en función de $z = i\omega$ y el valor de ε_0 (valor en donde se “colapsa” la banda de conducción) se obtienen numéricamente al exigir el cumplimiento de las condiciones impuestas en el método atómico, el valor de E_f es un parámetro del modelo asociado a la energía de los electrones localizados. Al obtener la solución numérica para las FG en el método atómico, podemos obtener las autoenergías ligadas al método atómico numéricamente como.

$$\sum_{\sigma c}(\omega) = [G_{\sigma}^{cc}(z)]^{-1} - \varepsilon_0 + z \quad (6.29)$$

$$\sum_{\sigma f}(\omega) = [G_{\sigma}^{ff}(z)]^{-1} - E_f + z \quad (6.30)$$

El caso no interactuante ($U = 0$) en el modelo de Anderson periódico, tiene solución analítica y exacta, lo que permite obtener las FG asociadas a los electrones localizados y de conducción de manera exacta; nuestro tratamiento de la topología en el sistema, ligada al acoplamiento *spin*-órbita, básicamente renormaliza el cuadrado de la hibridización V^2 del sistema por el factor $\Delta^2(\mathbf{k})$ obtenido en el capítulo 3, ecuación (3.33), esto es, el caso no interactuante con topología, se puede describir por las FG del caso no interactuante, cambiando V^2 por $V^2 * \Delta^2(\mathbf{k})$. Las FG del caso interactuante y con topología se definen como

$$[G_{\sigma,U \neq 0}^{ff}(z)]^{-1} = [G_{\sigma,U=0}^{ff}(z)]^{-1} - \sum_{\sigma f}(\omega), \quad (6.31)$$

$$[G_{\sigma,U \neq 0}^{cc}(z)]^{-1} = [G_{\sigma,U=0}^{cc}(z)]^{-1} - \sum_{\sigma c}(\omega), \quad (6.32)$$

en donde $G_{\sigma,U=0}^{cc}(z)$ y $G_{\sigma,U=0}^{ff}(z)$ corresponden a las FG del sistema no interactuante y con topología; estas FG se relacionan con las obtenidas para el tratamiento X-boson (2.4) y (2.5), teniendo en cuenta que los parámetros que determinan las correlaciones D_{σ} , Λ y J_H adquieren los valores por $D_{\sigma} = 1,0$, $\Lambda = 0,0$ y $J_H = 0,0$. $\sum_{\sigma c}(\omega)$ y $\sum_{\sigma f}(\omega)$ corresponden a las autoenergías obtenidas por el método atómico - ecuaciones (6,29) y (6,30).

6.1. Resultados

En la figura 6.1 se muestran los resultados para el modelo atómico con y sin topología en el límite Kondo de ocupación $N = 2,0$ el cual asegura el estado aislante del sistema, con

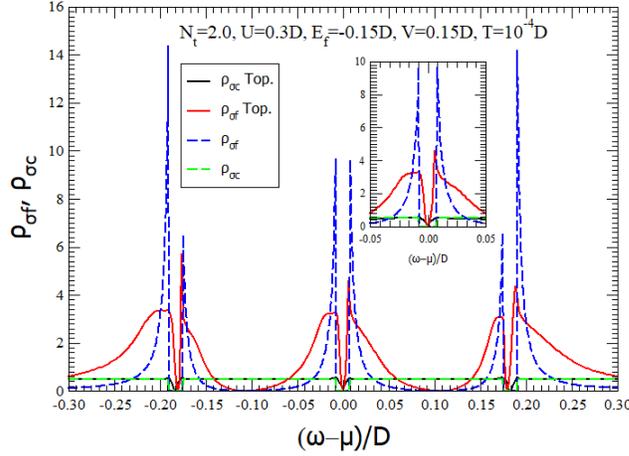


Figura 6.1.: Comparación de la densidad de estados para el sistema con y sin topología calculada en la condición simétrica del modelo ($U = 0,3D$, $E_f = -0,15D = -U/2$, $V = 0,15D$, $T = 10^{-4}D$, $t = D/4$) con ocupación total por sitio de la red $N = 2,0$ a muy bajas temperaturas.

correlación finita $U = 0,3D$ a muy bajas temperaturas $T = 10^{-4}D$, donde D es el parámetro asociado con el semi-ancho de banda (en relación con los cálculos por *X-boson* $D = 4t$). Las correlaciones antiferromagnéticas han sido omitidas por simplicidad de la implementación del método atómico. En la figura 6.1 se observa un estado totalmente aislante para las densidades calculadas sin topología $\rho_{\sigma\{c,f\}}$ presentes en el nivel de Fermi. Para la densidad de estados con topología es posible notar una forma en *V* (*inset* de la figura 6.1), característico del sistema semi-metálico descrito por el modelo *X-boson* debido al acoplamiento espín-órbita contenida en la hibridización, tanto en la densidad de los estados localizados $\rho_{\sigma,f}^{Top.}$, como para la densidad de los electrones de conducción $\rho_{\sigma,c}^{Top.}$. Aparentemente existe una leve asimetría en la densidad de estados $\rho_{\sigma,f,c}^{Top.}$, pero al integrar la densidad de estados se encuentra que existe una simetría electrón hueco. La profundidad del *gap* en forma de *V* de ambos tipos de electrones se grafican en escala semi-logarítmica como se observa en la figura 6.2(Izq.) la diferencia en los mínimos alrededor del nivel de Fermi es aproximadamente de tres ordenes de magnitud, siendo menor el mínimo en la densidad de estados de los electrones *c* en el potencial químico - nivel de Fermi, este resultado es cualitativamente similar al obtenido en los capítulos 2 y 3 empleando la aproximación *X-boson*, que tiene un carácter campo medio, al obtener un valor de la densidad de estados *f* en el potencial químico mucho mayor al mismo para la densidad de estados *c* en el mismo punto, cuando no se tienen correlaciones antiferromagnéticas entre los estados localizados $J_H = 0,0$. La figura 6,1 muestra una estructura de tres picos, que abren *gaps* de hibridización en medio de los picos, característica del modelo de Anderson periódico, el pico en el potencial químico está asociado al pico de

Kondo, que a bajas temperaturas abre un *gap* debido a la presencia del efecto Kondo para la red, esta apertura del *gap* nos garantiza la obtención de un aislante Kondo en el sistema; los picos “satélites” entorno al potencial químico están ligados a la posibilidad de tener doble ocupación, la separación entre los valores de frecuencia a los cuales se “inician” los picos $\pm 15D$ es el valor de la repulsión Coulombiana $U = 0,3D$.

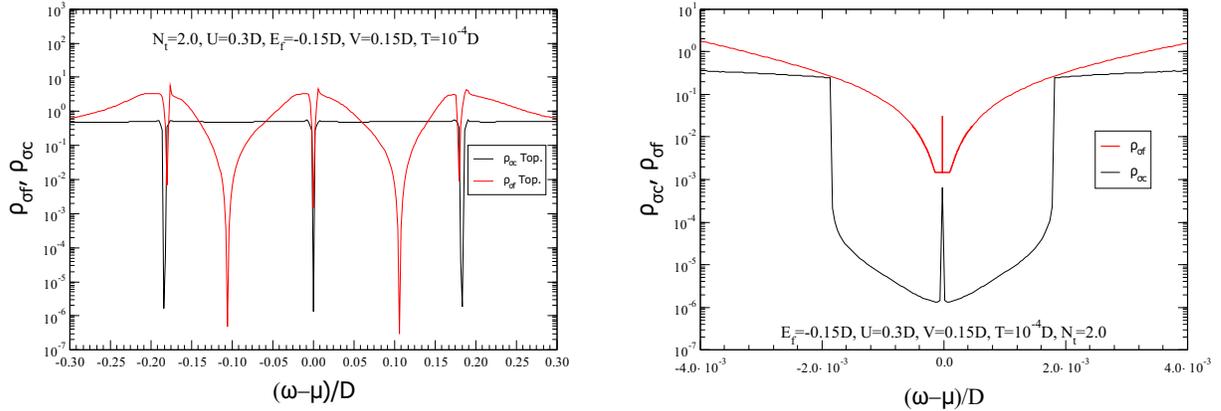


Figura 6.2.: (Izq.) Densidad de estados para el sistema con topología en escala semi-logarítmica usando los mismos parámetros de la figura 6.1 obtenidos en la aproximación atómica. (Der.) Acercamiento de densidad de estados para los electrones de conducción (ρ_{σ_c}) y electrones localizados (ρ_{σ_f}) en el entorno del potencial químico mostrando estados *in-gap* para el modelo atómico con topología integrando sobre la zona de Brillouin completa $k_x \times k_y: [-\pi/a : \pi/a]$, con a como el parámetro de red.

En la figura 6.2(Der.) muestra un acercamiento en torno al nivel de Fermi con mayor resolución en el cálculo, el cual da cuenta de un aumento abrupto en las densidades de estados $\rho_{\sigma_c}^{Top}$ y $\rho_{\sigma_f}^{Top}$ justo en el nivel de Fermi donde el *gap* aislante es más ancho para los electrones de conducción que para los electrones localizados. Este aumento es similar al encontrado en el modelo *X-boson* en el capítulo inmediatamente anterior y corresponden de igual manera a la evidencia de estados *in-gap* que dan lugar al *plateau* en la resistencia del $S\text{m}B_6$ debido a la contribución de electrones de conducción pero con mayor densidad por los electrones localizados^{76,106}.

6.1.1. Espectro de fotoemisión del modelo atómico.

Para hacer un estudio más detallado de los estados *in-gap* calculamos el espectro de fotoemisión usando la densidad de estados obtenida en 6.2. Como se muestra en la figura 6.3 el

espectro de fotoemisión se integra sobre toda la zona de Brillouin a muy bajas temperaturas como se describen en las ecuaciones (5.12) e (5.14), calculados con los mismos parámetros de la densidad de estados de la figura 6.2. En estos resultados se observan picos sobresalientes alrededor del nivel de Fermi ($\omega - \mu) = 0,0D$ correspondientes a los niveles de energía $4f^n \rightarrow 4f^{n-1}$ del multiplete 5/2 cuando pierden un electrón el desdoble de picos originados por la pérdida de uno y dos electrones correspondientes a las transiciones de Sm^{2+} y Sm^{3+} en el SmB_6 por su carácter de valencia intermedia⁸². Teniendo en cuenta la densidad de estados en los valores de los *gaps* generados por la repulsión coulombiana se repite la forma de los dos picos en el resultado de PES y de forma análoga en IPES. Adicionalmente se puede apreciar un mínimo en los espectros de PES/IPES en la mitad de la estructura entre el nivel de Fermi y la resonancia por repulsión coulombiana. Éste mínimo es asociado con la hibridización entre los electrones *f* y *c* la cual es notable en la densidad de estados de los estados localizados. La figura 6.3(Der.) muestra un acercamiento alrededor del nivel de Fermi en una

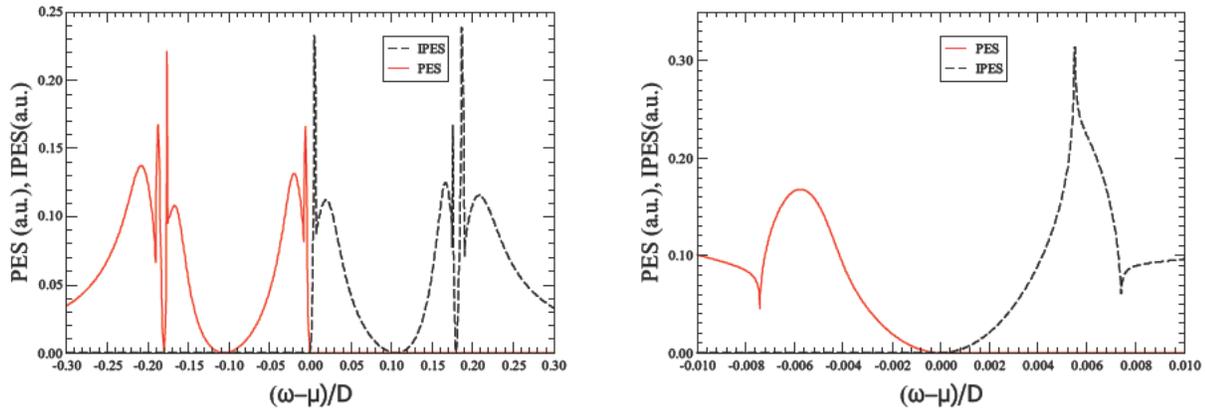


Figura 6.3.: (Izq.) Espectro de fotoemisión (PES/IPES) para el modelo atómico con topología integrado en toda la zona de Brillouin. (Der.) Acercamiento de la respuesta de PES/IPES alrededor del nivel de energía de Fermi.

ventana entre $(\omega - \mu) = \pm 0,01D$, donde se ilustran los picos cercanos a $\omega - \mu = 0,0D$. Una asimetría en los picos de PES e IPES es el resultado de la asimetría presente en la densidad de estados de la figura 6.2(Izq.). Para determinar si estos picos coinciden con los estados *in-gap* en los puntos de alta simetría calculamos los espectros en la dirección de *X* y Γ como se muestra en la figura 6.4.

En la figura 6.4 se muestran los resultados de PES/IPES para los puntos de alta simetría *X* 6.4(Izq.) y Γ 6.4(Der.), para dos valores de temperaturas $T = 10^{-4}D$ y $T = 10^{-3}D$ en la ventana $(\omega - \mu) = \pm 0,01D$. Una diferencia notable del espectro en *X* es el pico alrededor de $(\omega - \mu) = -0,003D$ presente en las dos temperaturas empleadas tanto en el espectro de PES como el de IPES. Mientras en Γ este pico está ausente.

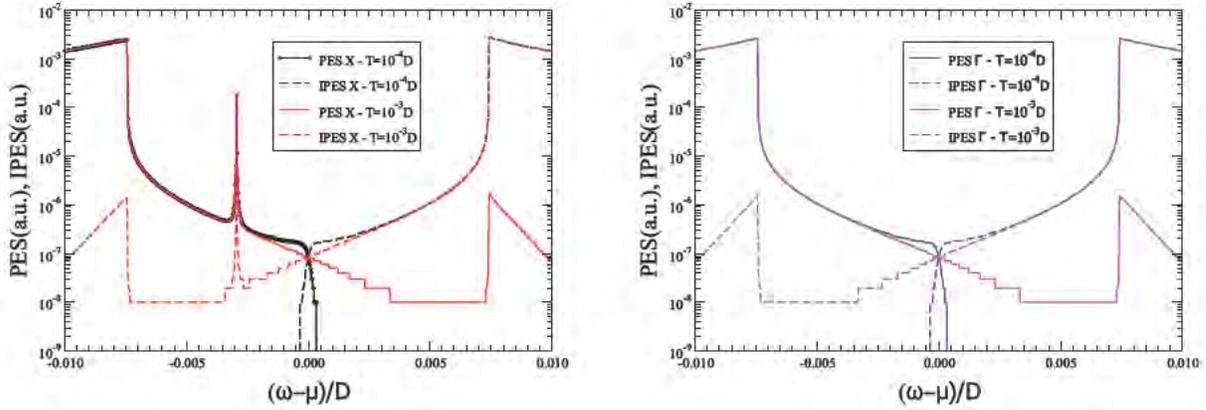


Figura 6.4.: Espectro de fotoemisión para los puntos de simetría (Izq.) X y (Der.) Γ calculados en una ventana alrededor del nivel de Fermi $[-0,01 : 0,01]D$.

Aunque el pico perteneciente a los estados dentro del *gap* aislante sea notable en los cálculos realizados en ambos modelos *X-boson* con correlaciones AFM y el método atómico con repulsión coulombiana finita sin correlaciones AFM, es posible que no sea fácilmente detectable experimentalmente debido a la ventana tan estrecha alrededor del nivel de Fermi y la alta resolución de la espectroscopia cuyas intensidades son menores a los valores donde termina el *gap* aislante alrededor de $(\omega - \mu = \pm 0,08D)$ como se aprecia en las figuras en 6.4.

Como se expuso en el capítulo anterior, nuestros resultados indican que la conformación de los *in-gap* states en el SmB_6 pueden estar asociados a la renormalización de la hibridización, ligada al acoplamiento spin-orbita y en particular a la representación Γ_8^1 del multiplete $J = 5/2$, además que las contribuciones a PES/IPES en torno del punto X de alta simetría son mucho mayores que las obtenidas en torno al punto Γ (casi tres ordenes de magnitud), lo que debe de estar asociado a la presencia de los estados topológicos ligados a la interacción *spin-orbita* en torno al punto X , como se obtuvo en la descripción de campo medio.

7. Propiedades termoeléctricas en Aislantes Kondo Topológicos

Las propiedades termoeléctricas son calculadas en condiciones estacionarias, en el régimen lineal usando la aproximación de Landauer para las funciones de Green cerca del equilibrio. Un voltaje *bias* ($\Delta V = V_L - V_R$) a través de los conductores de la izquierda (L) y de la derecha (R) que conectan la estructura 2D del sistema de AKT. Además se aplica una pequeña diferencia de temperatura ($\Delta T = T_L - T_R$). De la teoría de respuesta lineal es posible encontrar que: una corriente J_α fluye por el sistema debido a gradientes de temperatura $\vec{\nabla}T$ o por la existencia de campos eléctricos $\vec{E} = -\vec{\nabla}V$. En los AKT el potencial químico (μ) se encuentra por autoconsistencia satisfaciendo la conservación del número total de partículas por sitio *X-boson*. Los cambios de entropía en una región de volumen constante se relacionan con la energía interna y el número de electrones por la identidad⁵⁷

$$TdS = dU - \mu dN \quad (7.1)$$

o en términos de densidad de corriente de tal forma que la densidad de corriente de carga (\vec{J}) y la densidad de corriente de calor (\vec{Q}) que circulan por el sistema¹⁴⁸.

7.1. Propiedades de transporte para la red en el Modelo de Anderson Periódico

Los coeficientes de transporte para el modelo de Anderson periódico fueron derivadas por C. Grenzebach (*et. al.*)^{149,150} empleando relaciones estándar para la densidad corriente de carga eléctrica \vec{J} y la densidad de corriente de calor \vec{Q} las cuales dependen linealmente del campo eléctrico \vec{E} y el gradiente de temperatura $\vec{\nabla}T$:

$$\vec{J} = L_{11}\vec{E} + L_{12}\left(\frac{-\vec{\nabla}T}{T}\right), \quad (7.2)$$

$$\vec{Q} = L_{21}\vec{E} + L_{22}\left(\frac{-\nabla T}{T}\right). \quad (7.3)$$

Todos los coeficientes (L_{ij}) son calculados teniendo en cuenta la teoría de respuesta lineal, empleando la formula de Kubo. Por simetría se considera $L_{12} = L_{21}$.

La formula de Kubo es expresada en términos de las funciones de Green de dos partículas con correcciones de vértice, las cuales reflejan interacciones residuales de partícula-partícula. Para una hibridización independiente de \mathbf{k} , los electrones de conducción llevan las corrientes de carga y calor. Sin embargo, en el límite $d \rightarrow \infty$ se puede mostrar que las correcciones de los vértices se anulan para cualquier modelo de red de electrones fuertemente correlacionados^{151,152,153}. De esta manera la formulación del X -boson es consistente para un vector \vec{k} independiente de la autoenergía donde las correcciones de los vértices se anulan para cualquier modelo de la red de un sistema correlacionado. Usando la red hipercúbica de C. Grenzebach *et. al.*^{149,150} se calculan los coeficientes de transporte generalizados.

$$L_{11} = \frac{e^2}{ha} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{-\partial n_F}{\partial \omega}\right) \tau(\omega) d\omega, \quad (7.4)$$

$$L_{12} = \frac{e}{ha} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{-\partial n_F}{\partial \omega}\right) (\omega - \mu) \tau(\omega) d\omega, \quad (7.5)$$

$$L_{22} = \frac{1}{ha} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{-\partial n_F}{\partial \omega}\right) (\omega - \mu)^2 \tau(\omega) d\omega, \quad (7.6)$$

el tiempo de relajación es calculado como

$$\tau(\omega) = \frac{2\pi(t^*)^2}{d} \int_{-\infty}^{\infty} \rho_o(\epsilon) \rho_c^2(\epsilon, \omega) d\epsilon, \quad (7.7)$$

donde d es la dimensión del sistema real y t^* es el parámetro de *hopping* para la red hipercúbica de la que resulta la energía de los electrones de conducción^{143,154}

$$\epsilon(\mathbf{k}) = - \left(\frac{2t^*}{\sqrt{2d}}\right) \sum_{\nu=1}^d \cos(a k_\nu). \quad (7.8)$$

En nuestros cálculos se considera una banda de conducción rectangular no perturbada

$$\rho_o(\epsilon_{\mathbf{k}}) = \begin{cases} \frac{1}{2D}, & \text{for } -D \leq \epsilon_{\mathbf{k}} \leq D \\ 0, & \text{en cualquier otra parte} \end{cases} \quad (7.9)$$

y para relacionar t^* con la banda de conducción de ancho medio D se considera que el ancho de banda $\sqrt{2d} 2t$ de la ecuación (7.8) debe ser igual a $2D$, por lo tanto $t^* = D/\sqrt{2d}$. a

por su parte, responde al parámetro de red. De esta forma el tiempo de relajación puede ser reescrito como

$$\tau(\omega) = \frac{2\pi(t^*)^2}{2dD} \int_{-D-\mu}^{D-\mu} \rho_c^2(\epsilon, \omega) d\epsilon. \quad (7.10)$$

De la función de Green obtenida en Eq. 2.5 es posible calcular $\rho_c^2(\epsilon, \omega)$. Las propiedades termoelectricas se expresan en términos de los coeficientes L_{11} , L_{12} y L_{22} (7.4-7.6). La conductividad estática G y la resistividad eléctrica ρ dada por

$$G = L_{11}, \quad \rho = 1/G, \quad (7.11)$$

la termopotencia lineal medida por el coeficiente Seebeck es dado por

$$S = \frac{L_{12}}{TL_{11}}, \quad (7.12)$$

la conductancia térmica

$$\kappa = \frac{1}{T} \left(L_{22} - \frac{L_{12}^2}{L_{11}} \right), \quad (7.13)$$

la medida adimensional de eficiencia térmica dada por la figura térmica de mérito

$$ZT = \frac{S^2}{\kappa\rho} T = \frac{S^2 G}{\kappa} T, \quad (7.14)$$

y por último la relación de Wiedemann-Franz

$$WFL = \frac{3\kappa}{\pi^2 GT}. \quad (7.15)$$

La razón entre la conductividad térmica y la conductividad eléctrica por temperatura es igual al número de Lorentz L_0 definido por

$$L_0 = \frac{\kappa}{GT} = \frac{\pi^2 k_B^2}{3e^2} = 2,44 \times 10^{-8} \text{W}\Omega\text{K}^{-2}. \quad (7.16)$$

Este resultado refleja que tanto la corriente térmica como la corriente eléctrica están a cargo de las mismas cuasipartículas fermiónicas y es valido estrictamente en el límite de temperatura cero, aunque a temperatura ambiente también es valida aún cuando las dispersiones inelásticas son activadas^{57,155,156}. Sin embargo, las desviaciones respecto a L_0 equivalen a efectos de confinamiento, interacciones o separaciones de espín y carga que llevan a cabo de diferente forma la conducción de electrones y calor^{157,158}, por consiguiente destruyen el marco de partícula simple de la teoría de Fermi.

Por otra parte se espera una alteración de la ley de Wiedemann-Franz debido a los estados superficiales que presentan separación de carga y espín. Además puede ofrecer una forma alternativa de medir los estados topológicos.

7.2. Resultados

Las propiedades termoeléctricas como: la conductancia eléctrica (G), conductancia térmica κ , resistividad eléctrica (ρ), termopotencia (S), ley de Wiedemann-Franz (WFL) y figura térmica de mérito por temperatura (ZT), son estudiadas en función de la temperatura para diferentes valores del acoplamiento antiferromagnético entre estados localizados J_H de $-0,15t$ a $0,0t$. El número de ocupación N_t se mantiene constante en $N_t = 1,6667$. Para los diferentes valores de energía E_f que satisfacen el estado topológico en cada valor de J_H .

Una de las motivaciones principales del estudio de las propiedades termoeléctricas y particularmente en la conductancia eléctrica, es entender el origen de los estados superficiales propuestos con anterioridad por diferentes autores^{159,103,160,161,162,163} si corresponden a un estado no trivial de invariante topológica y obtener información de como son modulados los efectos topológicos por los efectos de la fuerte correlación.

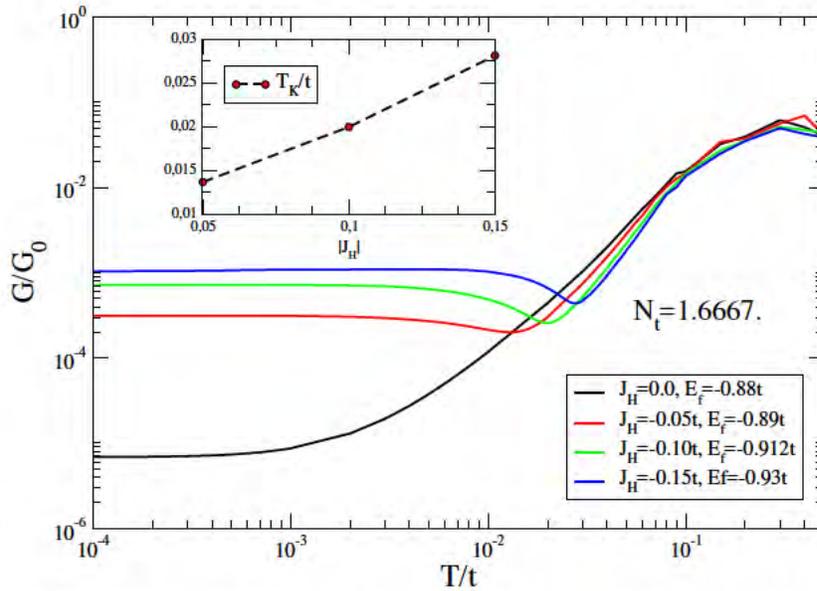


Figura 7.1.: Conductancia eléctrica en función de la temperatura, con los valores correctos donde se obtiene el estado topológico para cada valor de J_H .

En la figura 7.1 se muestra la conductancia eléctrica en función de la temperatura $G(T)$ normalizada a $G_0 = \frac{2e^2}{h}$ para diferentes valores de acoplamiento antiferromagnético (AFM) entre estados localizados J_H . Para el sistema sin acoplamiento J_H la conductancia eléctrica decrece conforme decrece la temperatura, mostrando una conductancia residual formando un *plateau* para valores por debajo de $T = 0,001t$. A medida que el acoplamiento AFM se fortalece ($|J_H| > 0$), aumenta la conductancia residual y un mínimo en $G(T)/G_0$ se origina en valores de temperatura que tiene un corrimiento positivo conforme aumenta la temperatura. Este mínimo está relacionado con el cruce por la temperatura Kondo (T_K) hasta alcanzar la

temperatura de AKT (T_{AKT}) que da origen a estados superficiales del sistema. Los estados superficiales se asocian con la conductancia residual por debajo de la T_{AKT} . Las fuertes correlaciones ($|J_H|$) aumentan la T_K como se puede notar en el *inset* de la figura 7.1. Por otro lado para altas temperaturas, las correlaciones pierden su efecto y la conductancia tiende a converger al mismo valor. Es decir, las dispersiones debidas a la alta temperatura son más fuertes que las correlaciones.

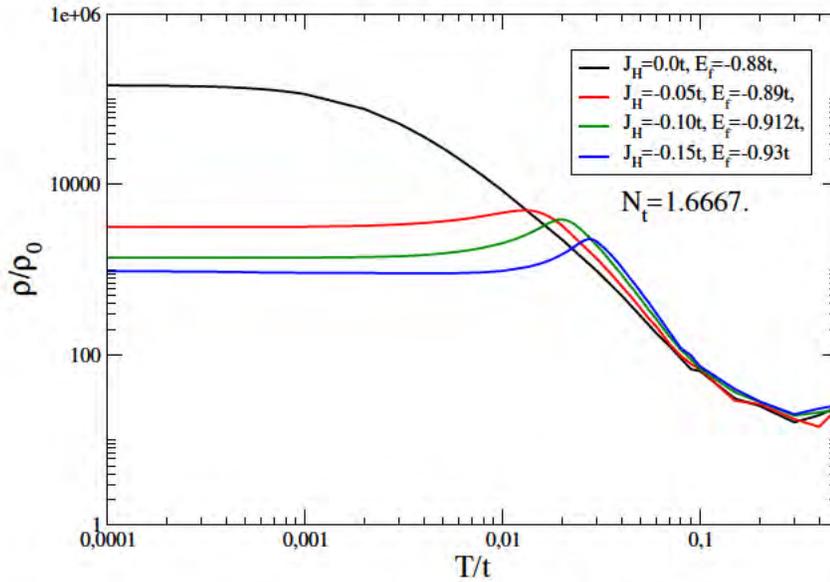


Figura 7.2.: Resistividad vs temperatura para el sistema de Aislante Kondo Topológico para diferentes valores de acoplamiento antiferromagnético J_H . (Izq.) En el estado AKT de $J_H = -0,10t$. (Der.) en el estado topológico con el valor correspondiente para cada J_H . La línea punteada en (Der.) corresponde a la entrada del *plateau* de los estados superficiales.

En la figura 7.2 se encuentran los resultados de la resistividad eléctrica R en función de la temperatura variando el valor del acoplamiento antiferromagnético. La resistividad presenta una disminución en su valor residual con el aumento de $|J_H|$ de forma consistente con los resultados de G/G_0 7.1 la aparición de los estados superficiales por debajo de T_{min} disminuyen la resistividad total del sistema formando un *plateau* consistente con resultados previos por Beille *et. al.* (1983)¹⁵⁹ y Cooley *et. al.* (2003)¹⁰³. El aumento de la resistividad esta de acuerdo con la transición metal-aislante causada por la fuerte interacción entre los estados localizados y los electrones de conducción, en este caso además de la transición metal-aislante se obtiene una transición de metal-aislante topológico. Sin embargo, este aumento en la resistividad puede ser controlado en la practica con incrementos de presión en sistema cuando esta aumenta por encima de $\sim 4Gpa$ para temperaturas por debajo de $4K$, el efecto de las correlaciones $c-f$ compiten con el estado Kondo^{16,160,123} (figura 7.3). En los resultados obtenidos en la figura 7.2 el aumento de las correlaciones AFM entre estados localizados simulan

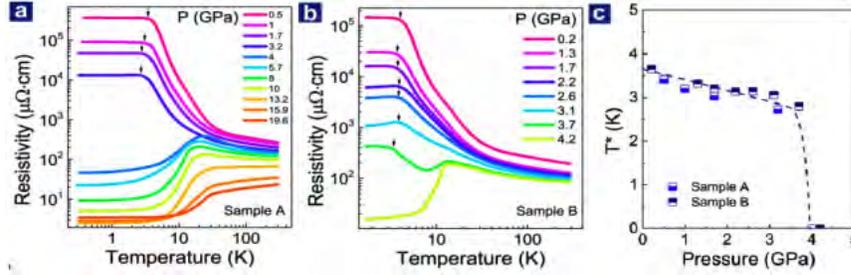


Figura 7.3.: Resultados de resistividad en función de la temperatura con disminución de la resistividad por aplicación de alta presión en dos muestras de mono cristales de SmB_6 , muestran una transición de fase de líquido de Fermi a aislante Kondo alrededor de $\sim 4GPa$. Las figuras son tomadas del trabajo experimental de Yazhou Zhou *et. al.* (2017)¹⁶. (a) y (b) son dos muestras diferentes de SmB_6 y (c) muestra el cambio de la temperatura donde se obtiene el *plateau* (T^*) de los estados superficiales.

el aumento de la presión. La competencia del estado Kondo del sistema y la hibridización entre los estados $c - f$ modulan el pico antes de alcanzar una conductancia residual de los estados superficiales del sistema como se muestra en resultados experimentales¹⁶.

La figura 7.4 corresponde a los resultados obtenidos para la conductancia térmica en escala $\log - \log$ siguiendo la expresión (7.13), para el estado topológico variando las correlaciones AFM. En las curvas de la figura de 7.4 se presenta un cambio en las pendientes a partir de la temperatura de transición que coincide con los valores de T_K de la conductividad eléctrica. Sin embargo, al encender la interacción AFM (J_H) las pendientes en κ por debajo de T_K son paralelas siguiendo la misma ley de potencias (tienen la misma pendiente). En comparación con los resultados de la conductancia eléctrica y como se verá más adelante con la ley de Wiedemann-Franz, el sistema sigue el comportamiento típico de un líquido de Fermi por debajo de T_K exceptuando para $J_H = 0,0t$ donde el sistema tiene una pendiente diferente. Para temperaturas por encima de $T = 0,1t$ el valor de κ converge a un mismo valor para todos los valores del acoplamiento AFM J_H indicando que las correlaciones AFM distinguen al sistema para valores bajos de temperatura. En nuestra escala para valores menores a $T = 0,1t$ o más aún para valores menores a T_K .

Por su parte, la termopotencia obtenida de la ecuación (7.12) presenta los resultados en la figura 7.5. Al variar el acoplamiento AFM alrededor del estado topológico, el sistema presenta un aporte a la termopotencia debida a los electrones por el valor negativo en termopotencia con un aumento monótonico por debajo de la temperatura de transición topológica T_{Top} , por encima de esta temperatura se presentan fluctuaciones de carga que aumentan conside-

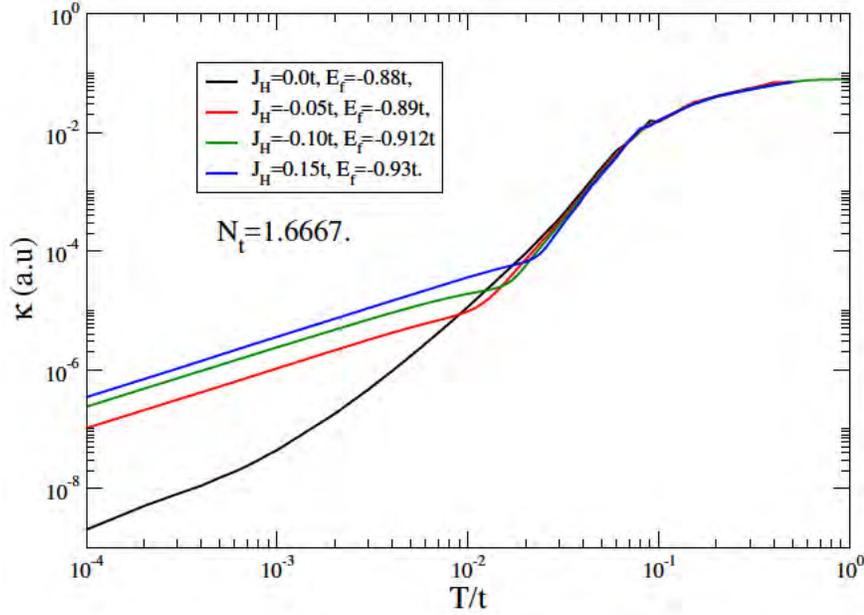


Figura 7.4.: Conductividad térmica para el aislante Kondo topológico. (a) En estado topológico $J_H = -0,10t$ y (b) en el estado topológico para cada J_H .

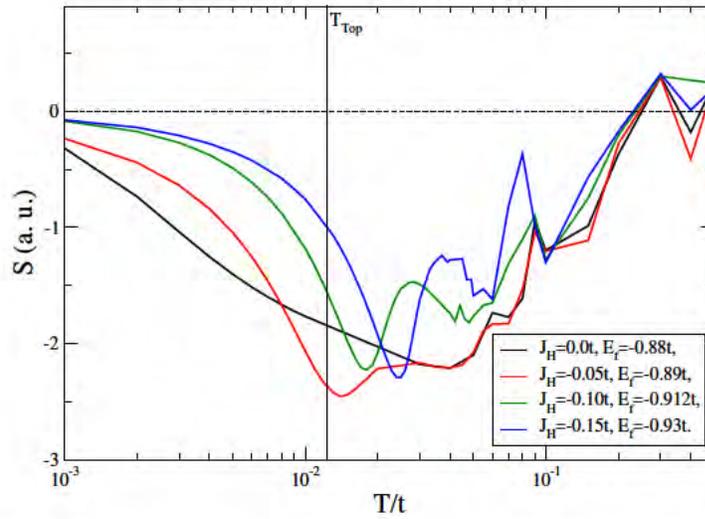


Figura 7.5.: Termopotencia (S) para AKT en función de la temperatura para el estado topológico (Izq.) con $J_H = -0,10t$ y (Der.) para el estado topológico de cada uno de los diferentes valores de J_H .

rablemente al aumentar las correlaciones tendiendo a converger por encima de $T = 0,1t$. Un cambio de portadores de electrones a huecos es evidente por el signo de la oscilación en S por arriba de $T = 0,2t$ para todos los valores de J_H .

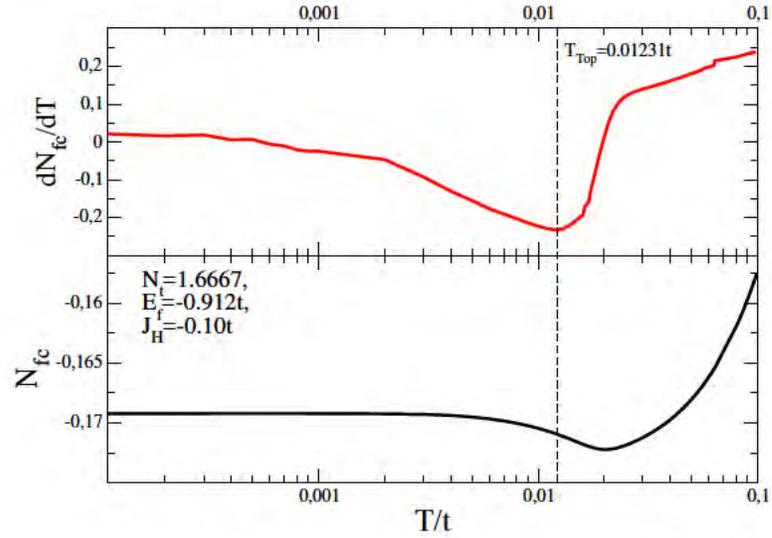


Figura 7.6.: Derivada del número de ocupación de la función de Green cruzada respecto a la temperatura. Este cálculo permite encontrar las desviaciones del número de ocupación para notar la temperatura de transición a la cual ocurre el paso de estado Kondo a estado topológico.

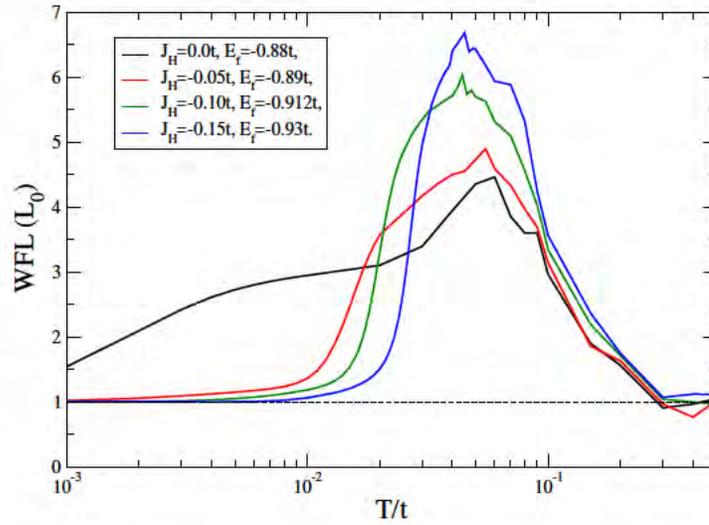


Figura 7.7.: Ley de Wiedemann-Franz en función de la temperatura para diferentes valores de J_H en el estado aislante Kondo topológico de cada valor de J_H con número de ocupación constante $N_t = 1,6667$.

Un aspecto notable respecto en los resultados presentados en la conductancia térmica (figura 7.4) es que por debajo de la temperatura de transición al estado Kondo topológico, presentan dos ordenes de magnitud más bajo que la conductancia eléctrica (figura 7.5). Usualmente la relación entre ambas conductancias está descrita por la ley de Wiedemann-Franz y la razón de ambas medidas es una constante como describen las ecuaciones (7.15) y (7.16). Como

se expuso al inicio del capítulo, las desviaciones de la ley de Wiedemann-Franz indican una separación de los mecanismos responsables de las corrientes eléctricas y las corrientes de calor. En particular, para los resultados que se muestran en la figura 7.7 se ha renormalizado por la constante de Lorentz, así las desviaciones de WFL oscilaran alrededor de la unidad. Para $J_H = 0,0t$ el sistema se encuentra siempre fuera del marco de líquido de Fermi, mientras que para valores diferentes de $J_H \neq 0$ el sistema presenta comportamiento de líquido de Fermi por debajo de la temperatura de estado topológico. Mientras que para valores mayores a T_{Top} la competencia de las correlaciones se limitan a las interacciones entre los electrones de conducción y los estados localizados, en este régimen corresponde a un estado Kondo pero no topológico el cual también desaparece para temperaturas mayores a $T = 0,1t$.

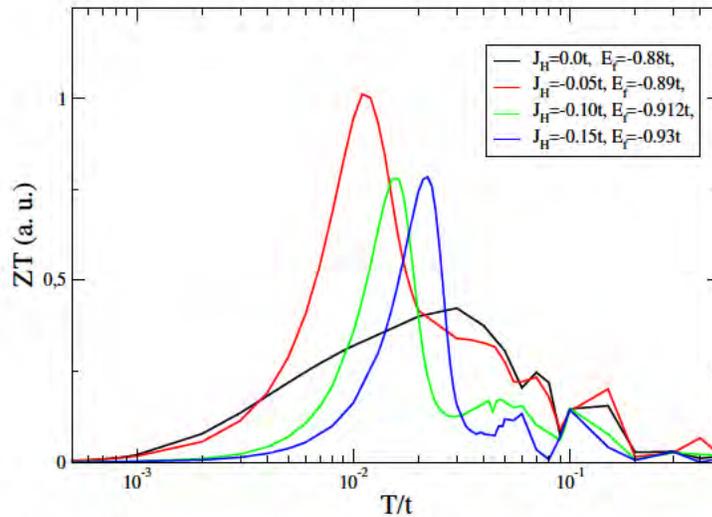


Figura 7.8.: Figura térmica de mérito para aislantes Kondo topológicos en el estado topológico de (Izq.) $J_H = -0,10t$. (Der.) En el estado topológico de cada valor de J_H .

En la figura 7.8 se muestran los resultados para la eficiencia termoeléctrica por temperatura ZT . Teniendo en cuenta los valores de la termopotencia S y conductancias eléctrica (G) y térmica (κ) y la expresión (7.14), como se observa ZT adquiere un valor importante alrededor del 0,75 en el estado aislante topológico $J_H = -0,10t$. En general, en el estado topológico no se adquiere el valor máximo en ZT pero este valor si puede modularse a través del control de las correlaciones antiferromagnéticas del sistema. Los valores máximos en ZT corresponden a valores diferentes de cero en las correlaciones AFM pero no aumentan con ellas. Estos valores altos surgen en el régimen de temperatura por debajo de la temperatura de Kondo.

8. Conclusiones generales.

Los modelos propuestos de *X-boson* y *Aproximación Atómica* permiten capturar efectos importantes de los sistemas fuertemente correlacionados en el régimen de bajas temperaturas, tanto para el modelo de la impureza de Anderson tal como se muestra en el capítulo 1, como para el modelo periódico (capítulos posteriores) que concuerdan cualitativamente con resultados experimentales y que pueden ser de gran ayuda experimental en el momento de escoger parámetros de ajuste para estudiar los diferentes efectos capturados en nuestros modelos.

En el capítulo 1 de la primera parte de esta tesis, se estudió el efecto de corriente de espín empleando la aproximación atómica para el modelo de la impureza de Anderson, con el fin de describir funciones de Green asociadas al problema. Éste tratamiento tiene un carácter de muchos cuerpos, ausente en tratamientos de campo medio como la aproximación de Hartree-Fock³. En el régimen de bajas temperaturas, los resultados están gobernados por la emergencia del pico Kondo en la transmitancia, el cual define el comportamiento del coeficiente S como una función de los parámetros del modelo. Se encuentran diferencias fundamentales con el modelo de Hartree-fock, donde se obtienen altos valores de S mientras la correlación coulombiana aumenta. Esto puede ser una limitante del modelo de Hartree-Fock puesto que no captura las fuertes interacciones causadas por la interacción de muchos cuerpos en tales circunstancias.

En la segunda parte correspondiente al estudio del sistema aislante Kondo topológico. En ambos métodos (*X-boson* y método atómico) fue posible *mapear* el cambio en las densidades de estados *V-shaped*, debidos al acoplamiento espín-órbita cargados al sistema por medio de la hibridización dependiente del momentum $V(\mathbf{k})$ en un sistema bidimensional. Con diferencias fundamentales en la descripción de propiedades físicas con respecto a tratamientos complementarios de campo medio como el *slave-boson*, este método origina la formación de estados no físicos en los números de ocupación como se mostró en el capítulo 3, dando una descripción no realista cuando el sistema se aleja de la condición Kondo, es decir cuando no se tiene ocupación entera en los estados localizados asociados al modelo. Este es el caso del SmB_6 que presenta valencia intermedia Sm^{2+} y Sm^{3+} , en el SmB_6 el régimen de valencia intermedia es importante para la descripción de la formación de los estados superficiales topológicos.

En el capítulo 3 se calcularon los cambios en las correlaciones introduciendo una interacción antiferromagnética J_H a primeros vecinos, tiende a abrir un *gap* sin eliminar su forma en V como se visualiza en la densidad de estados para los dos tipos de electrones (c , f) en escala logarítmica. Para el valor de $J_H = -0,10t$ como se refleja en las propiedades sobre todo en las ópticas se obtiene una densidad finita alrededor de los puntos de simetría X similar a la condición topológica que se observa experimentalmente. Este tipo de correlación permite demarcar una transición metal-aislante topológico-metal a partir de las densidades de estados en función de la energía E_f . También se resalta la cooperación de las correlaciones AFM de corto alcance y la interacción Kondo en la formación del estado topológico. El conjunto de parámetros para el estado topológico es usado para hacer cálculos de propiedades ópticas como el espectro de fotoemisión integrado (PES/IPES) donde se evidencia un hombro con una densidad electrónica finita en la superficie de Fermi que se entiende como la presencia de estados *in-gap* en el sistema (capítulo 4), debemos destacar que los resultados de PES entorno al punto X de alta simetría en la zona de Brillouin muestran una contribución mucho mayor (al menos dos órdenes de magnitud) que la obtenida entorno al punto Γ , lo que está en acuerdo con los resultados obtenidos para la relación de dispersión, la cuál muestra que el estado topológico asociado a la formación de un cono de Dirac se da en el punto X . Estos cálculos son contrastados con los cálculos de ARPES al final del capítulo, los cuales dan cuenta de la diferencia del estado topológico con estados superficiales en el punto de alta simetría X a bajas temperaturas que va desapareciendo alrededor de $T = 0,013t$ donde existe una transición de estado aislante Kondo a aislante Kondo topológico al bajar la temperatura. Para dar evidencia más profunda acerca de los estados *in-gap* se realiza un cálculo más extensivo, obteniendo la densidad de estados de electrones de conducción y de estados localizados con presencia de un pico abrupto dentro del *gap* que da lugar a los estados superficiales del sistema, y que de acuerdo a nuestros resultados se originan debido al “desacoplamiento” de los electrones de conducción (c) y localizados (f) ya que la representación del grupo de simetría Γ_8^1 que describe la forma como se “desdoblan” los niveles de energía asociados al multiplete $J = 5/2$ presente debido al acoplamiento espín-órbita y la estructura de los orbitales iónicos de los átomos de Sm en la estructura cristalina del SmB_6 , origina una renormalización de la hibridación dependiente del vector de onda ($V(\mathbf{k})$) que se anula en todos los puntos de alta simetría (Γ , X y M). Por otro lado se usa la aproximación atómica, que tiene un carácter de muchos cuerpos, y que fue empleada en el capítulo 2 con una extensión para el modelo de Anderson periódico para describir la física de los estados *in-gap*. En esta aproximación también es posible capturar la existencia de estados superficiales. Sin embargo, cabe resaltar que en la aproximación atómica no se incluye el término de acoplamiento AFM entre estados localizados, en vez de esto si se incluye la repulsión coulombiana finita, recordemos que el tratamiento del X -boson considera el límite de muy fuerte repulsión coulombiana en los estados localizados. De estos resultados se obtiene un

espectro más complejo y realista de las energías de enlace y los picos más pronunciados cerca al nivel de Fermi donde participan los estados dentro del *gap*, nuevamente los resultados para PES obtenidos alrededor de los puntos de alta simetría muestran una contribución mucho más importante entorno al punto X .

Por último usando el método *x-boson* y el conjunto de parámetros que reproducen la topología en el SmB_6 se calculan las propiedades termoeléctricas, logrando reproducir el comportamiento de la resistencia típica del SmB_6 con las implicaciones de las fuertes correlaciones entre estados localizados que proporciona un comportamiento análogo al encontrado en trabajos experimentales con cambios de presión. Por otro lado, se encuentra un régimen coherente como de líquido de Fermi siguiendo el modelo de las desviaciones de Wiedemann-Franz para temperaturas más bajas donde los estados superficiales tienen mayor participación. La termopotencia muestra un comportamiento usual con portadores de carga negativos que cambia en altas temperaturas donde desaparece la interacción Kondo. Para la figura de mérito se encuentra que puede ser modulada controlando el parámetro de interacciones antiferromagnéticas, donde el mayor valor de ZT se encuentra en $J_H = -0,05t$. Las temperaturas donde se obtienen los valores máximos en ZT están justo por debajo de la temperatura de transición de estado Kondo a Kondo topológico donde los estados superficiales tienen mayor importancia (capítulo 7).

Dentro de las perspectivas de este trabajo se encuentra la extensión del modelo para el sistema en 3D tanto para el modelo de *X-boson* como para el método atómico. También es posible con las funciones ya establecidas realizar el cálculo de la conductividad óptica, constante dieléctrica, calor específico, susceptibilidad magnética y propiedades termoeléctricas para el modelo atómico sin correlaciones AFM, además de resultados de ARPES. Por otro lado y de modo complementario la extensión del modelo con la inclusión de un campo magnético externo, además de la inclusión de las correlaciones AFM en el tratamiento del método atómico.

A. Implementación del método X-boson

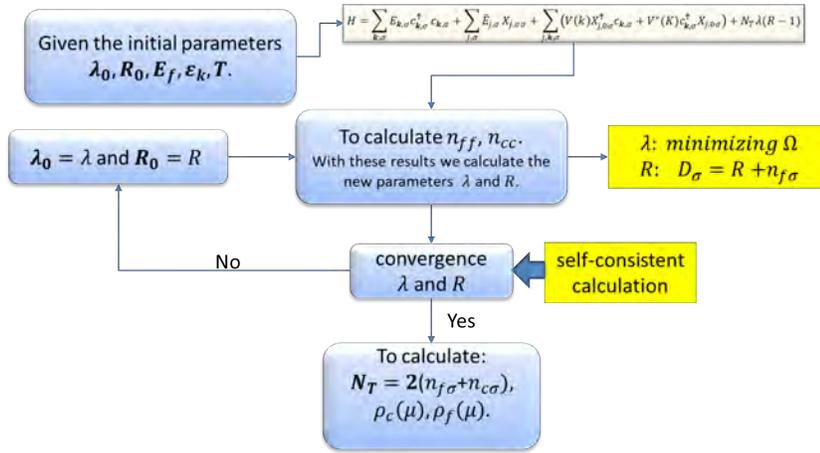


Figura A.1.: Esquema del procedimiento del cálculo del método de *X-boson* para el estudio del aislante Kondo topológico.

Para la implementación del método *X-boson* de forma general se aplica el procedimiento que sigue el esquema A.1. En el límite de $U \rightarrow \infty$ se limita al sistema a una ocupación máxima de un electrón por sitio. La ocupación electrónica es limitada por lo tanto el parámetro r corresponde en el método de bosón esclavo al valor que mide la ocupación de huecos. El valor $r^2 \rightarrow 0$ tiende a cero en la temperatura Kondo T_K . Sin embargo el Valor correspondiente para el método *X-boson* R permanece siempre positivo, eliminando transiciones no físicas del bosón esclavo y $n_{\sigma f} \rightarrow 1$ para cualquier valor de temperatura. Para un valor dado de λ_0 y R_0 se calculan los números de ocupación $n_{f\sigma}$ y $n_{c\sigma}$. En el caso del modelo periódico de Anderson el valor de lambda se calcula por medio de la minimización del potencial termodinámico $\Omega = -k_B T \ln(\mathcal{Q})$, mientras el parámetro R se obtiene de $D_\sigma = R + n_{f\sigma}$ auto consistentemente. El gran potencial termodinámico se obtiene de nuevo siguiendo las ecuaciones descritas en el capítulo II.

B. Implementación del método Atómico

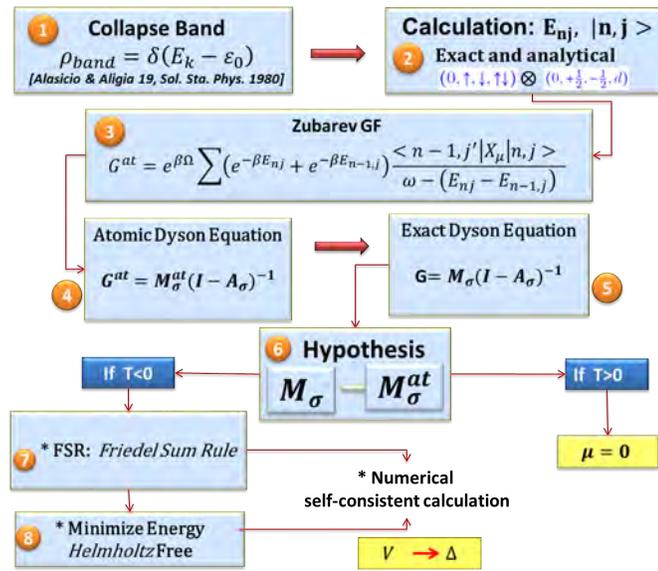


Figura B.1.: Esquema del procedimiento del cálculo para método de atómico en el estudio del aislante Kondo topológico.

La implementación del método atómico como se muestra en la figura B.1. Inicialmente se colapsa la banda de conducción a un valor ε_0 (1), seguido del cálculo de las autoenergías y autovectores exactos para el sistema colapsado (2). Se calculan las funciones de Green atómicas usando las funciones de Zubarev (3), con ellas se obtiene la solución de la ecuación de Dyson para el sistema aproximado (4, 5) y usando la hipótesis donde el cálculo de los cumulantes para el problema real es tan complicado como los aproximados se cambia M_σ^{at} (6) y se procede a satisfacer la regla de suma de Friedel (7) y la minimización de la energía libre (8) de forma autoconsistente el valor de la hibridización se reemplaza por el parámetro de Anderson descrito en 6.

C. Operadores X de Hubbard

Los operadores X de Hubbard⁷³, proyectan los estados del hamiltoniano efectivo (\mathcal{H}) a los estados propios de los estados localizados, de tal forma que toda la información que se obtiene del \mathcal{H} está dada en relación a la energía del estado localizado E_f .

Considérese un hamiltoniano \mathcal{H}_f cuya celda unitaria está centrada en un estado localizado f con algunos atomos por celda. $\{|p\rangle\} = |1\rangle, |2\rangle, \dots, |n\rangle$ representa un conjunto completo y normalizado de estados propios de \mathcal{H}_f formando una base local del espacio de Hilbert. Dicho de otra forma es un subespacio de Hilbert H_n . Ahora se define un operador de proyección

$$X_f^{ij} = |i\rangle\langle j|, \quad (\text{C.1})$$

donde i y j son estados propios de $\mathcal{H}_f(ij)$, con $1 \leq i \leq n$, $1 \leq j \leq n$. Cuando actúan sobre un estado $|l\rangle$

$$X_f^{ij}|l\rangle = |i\rangle\langle j|l\rangle = \delta_{jl}|i\rangle, \quad (\text{C.2})$$

definiendo un operador de transición de un estado $|j\rangle$ a un estado $|i\rangle$ y los operadores diagonales X_f^{ii} y X_f^{jj} son operadores de proyección

$$X_f^{nn}|l\rangle = |n\rangle\langle n|l\rangle = |n\rangle, \quad (X_f^{nn})^2 = X_f^{nn} \quad (\text{C.3})$$

mientras que para los operadores fuera de la diagonal son iguales a cero $(X_f^{ij})^2 = 0$. Los operadores X satisfacen un álgebra que cumple algunas reglas específicas:

a. Regla del producto

$$X_f^{i_1 j_1} \cdot X_f^{i_2 j_2} = |i_1\rangle\langle j_1|i_2\rangle\langle j_2| = \delta_{j_1 i_2} X_f^{i_1, j_2}. \quad (\text{C.4})$$

b. Conmutación

$$[X_f^{i_1 j_1}, X_g^{i_2 j_2}]_{\pm} = \delta_{fg} (\delta_{j_1 i_2} X_f^{i_1 j_2} \pm \delta_{i_1 j_2} X_f^{i_2 j_1}). \quad (\text{C.5})$$

Los operadores $X_j^{\alpha, \beta}$ pueden ser escritos en términos de combinaciones lineales de operadores de creación $c_{j, \sigma}^\dagger$ y destrucción $c_{j, \sigma}$ usuales.

$$c_{j, \mu} = \sum_{\alpha, \beta} \langle j, \alpha | c_{j, \mu} | j, \beta \rangle X_j^{\alpha, \beta} \quad (\text{C.6})$$

Diremos que $X_j^{\alpha,\beta}$ es de tipo Fermi cuando $|\alpha\rangle$ y $|\beta\rangle$ difieren por un número impar de fermiones y es de tipo Bose cuando la diferencia es par. Teniendo la relación de conmutación las relaciones de conmutación

- Carácter fermiónico

$$[X_f^{i_1 j_1}, X_g^{i_2 j_2}]_- = 0 \quad (j \neq i) \quad (\text{C.7})$$

- Carácter bosónico

$$[X_f^{i_1 j_1}, X_g^{i_2 j_2}]_+ = 0 \quad (j \neq i) \quad (\text{C.8})$$

c. Suma

$$\sum_i X_f^{ii} = \sum_i |i\rangle\langle i| = 1. \quad (\text{C.9})$$

Cualquier operador \hat{O}_f local puede ser escrito en términos de operadores de Hubbard. Para un modelo con cuatro estados $|0\rangle$ (vacío), $|\sigma\rangle$ (simple ocupación, $\sigma = \pm 1/2$) $|2\rangle$ (doble ocupación)

$$\begin{pmatrix} X^{00} & X^{0+} & X^{0-} & X^{02} \\ X^{+0} & X^{++} & X^{+-} & X^{+2} \\ X^{-0} & X^{-+} & X^{--} & X^{-2} \\ X^{20} & X^{2+} & X^{2-} & X^{22} \end{pmatrix}, \quad (\text{C.10})$$

de los cuales 8 operadores (en rojo) son tipo Fermi, 4 fuera de la diagonal tipo Bose (en azul) y 4 en la diagonal principal tipo Bose (en negro). Los operadores X , también pueden ser representados en operadores fermiónicos

$$X_{f,00} = (1 - n_{f\uparrow})(1 - n_{f\downarrow}), \quad (\text{C.11})$$

$$X_{f,\sigma\sigma} = n_{f,\sigma}(1 - n_{f\bar{\sigma}}), \quad (\text{C.12})$$

$$X_{f,22} = n_{f\uparrow}n_{f\downarrow}, \quad (\text{C.13})$$

$$X_{f,\sigma 0} = a_{f,\sigma}^\dagger(1 - n_{f\bar{\sigma}}), \quad (\text{C.14})$$

$$X_{f,2\sigma} = 2\sigma a_{f,\bar{\sigma}}^\dagger n_{f,\sigma} \quad (\text{C.15})$$

$$X_{f,\sigma\bar{\sigma}} = a_{f,\sigma}^\dagger a_{f,\bar{\sigma}} \quad (\text{C.16})$$

$$X_{f,20} = 2\sigma a_{f,\bar{\sigma}}^\dagger a_{f,\sigma}, \quad (\text{C.17})$$

con $-\sigma = \bar{\sigma}$. Un operador fermiónico puede ser representado por operadores de Hubbard

$$a_{f\sigma}^\dagger = X_{f,\sigma 0} + 2\sigma X_{f,2\bar{\sigma}}. \quad (\text{C.18})$$

Por ejemplo el operador número de ocupación queda descrito por

$$\hat{N} = \sum_{f,\sigma} a_{f\sigma}^\dagger a_{f\sigma} = \sum_f (0 \cdot X_{f,00} + 1 \cdot (X_{f,++} + X_{f,--} + 2X_{f,22})). \quad (\text{C.19})$$

D. Factor de Forma

Para sistemas electrónicos con estados $4f$ el desdoblamiento en los multipletes $j = 7/2$ y $j = 5/2$ de energía se produce primero por el acoplamiento espín órbita. Sin embargo el nivel $j = 7/2$ se encuentra muy lejos del nivel de Fermi según cálculos por *ab-initio*, por lo tanto no se tiene en cuenta en los cálculos de esta tesis⁸. El campo cristalino desdobla el nivel $j = 5/2$ en multipletes (Γ) con degeneración $2j + 1 = 6$, un doblete Γ_7 y un cuarteto Γ_8 como se describen a continuación

$$|\Gamma_7^f\rangle = \sqrt{\frac{5}{6}} \left| m_j = \pm \frac{3}{2} \right\rangle - \sqrt{\frac{1}{6}} \left| m_j = \mp \frac{5}{2} \right\rangle \quad (D.1)$$

$$|\Gamma_8^{(1)}\rangle = \sqrt{\frac{1}{6}} \left| m_j = \pm \frac{3}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{5}{6}} \left| m_j = \mp \frac{5}{2} \right\rangle \quad (D.2)$$

$$|\Gamma_8^{(2)}\rangle = \left| m_j = \pm \frac{1}{2} \right\rangle \quad (D.3)$$

El estado más bajo de energía cerca al nivel de Fermi corresponden a los multipletes $|\Gamma_8^{(1)}\rangle$ (carácter bidimensional) y $|\Gamma_8^{(2)}\rangle$ (para el caso de 3 dimensiones).

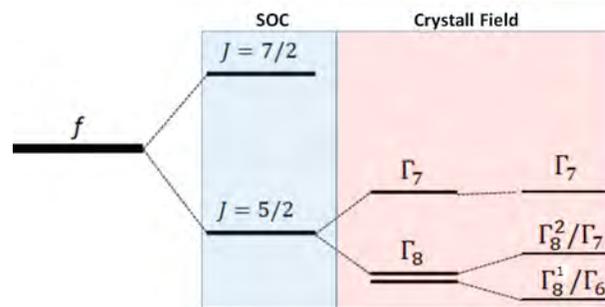


Figura D.1.: Desdoblamiento debido a la interacción espín órbita y el campo cristalino en un aislante Kondo topológico. La interacción espín órbita es más fuerte que el campo cristalino en este tipo de sistemas Kondo.

El cálculo del factor de forma del cual depende la hibridización de los estados localizados y

los electrones de conducción es descrito por el producto

$$\Phi(\mathbf{k}) = \vec{d}(\mathbf{k}) \circ \vec{\sigma} \quad (\text{D.4})$$

donde $\vec{d}(\mathbf{k})$ el vector de la red que depende de la estructura del sistema

$$\vec{d}(\mathbf{k})_{\Gamma_{8(1)}} = \vec{d}(\mathbf{k})_{2D} = (2\sqrt{3}i \sin(k_x), 2\sqrt{3}i \sin(k_y), 0) \quad (\text{D.5})$$

$$\vec{d}(\mathbf{k})_{\Gamma_{8(2)}} = \vec{d}(\mathbf{k})_{3D} = (-2i \sin(k_x), 2i \sin(k_y), 4i \sin(k_z)) \quad (\text{D.6})$$

y $\vec{\sigma}$ las matrices de Pauli, (siguiendo Tran *et. al* PRB 85, 125128 (2012)⁴⁷)

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{D.7})$$

efectuando el producto interior D.4

$$\Phi_{\Gamma_{8(1)}}(\mathbf{k}) = \vec{d}_{\Gamma_{8(1)}}(\mathbf{k}) \circ \vec{\sigma} = (2\sqrt{3}i \sin(k_x), 2\sqrt{3}i \sin(k_y)) \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \right] \quad (\text{D.8})$$

$$= (2(1-i) \sin(k_x), 2(1+i) \sin(k_y)), \quad (\text{D.9})$$

$$\Phi_{\Gamma_{8(1)}}^*(\mathbf{k}) = (2(1+i) \sin(k_x), 2(1-i) \sin(k_y)) \quad (\text{D.10})$$

$$\frac{1}{2} \left[\Phi_{\Gamma_{8(1)}}(\mathbf{k}) \Phi_{\Gamma_{8(1)}}^*(\mathbf{k}) \right] = 4(\sin(k_x) + \sin(k_y)) \quad (\text{D.11})$$

Δ^2 en 2D y 3D valores necesarios para el cálculo de relación de dispersión de la ecuación 5.11.

$$\Delta_{2D}^2 = 0,5Tr[\Phi(\mathbf{k}) \cdot \Phi^\dagger(\mathbf{k})] = 4(\sin^2(k_x) + \sin^2(k_y)) \quad (\text{D.12})$$

$$\Delta_{3D}^2 = 0,5Tr[\Phi(\mathbf{k}) \cdot \Phi^\dagger(\mathbf{k})] = 4(\sin^2(k_x) + \sin^2(k_y) + 4\sin^2(k_z)) \quad (\text{D.13})$$

La implementación de un sistema más realista para el SmB_6 puede ser descrito a través de la inclusión del multiplete Γ_8^2 en 3D.

E. Demostración Interacción tipo Heisenberg

En este apéndice vamos a demostrar que el Hamiltoniano de Heisenberg es un término de *hopping* haciendo un tratamiento de campo medio. Partiendo de su expresión natural el Hamiltoniano de Heisenberg está descrito por:

$$\mathcal{H}_H = -J_H \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = -J_H \sum_{\langle i,j \rangle} \left\{ S_z(i)S_z(j) + \frac{1}{2} [S_+(i)S_-(j) + S_-(i)S_+(j)] \right\} \quad (\text{E.1})$$

Si se consideran los dos estados de espín $|+\rangle$ y $|-\rangle$ en un sitio j cualquiera, tenemos

$$S_+|-\rangle = |+\rangle \quad (\text{E.2})$$

$$S_-|+\rangle = |-\rangle \quad (\text{E.3})$$

$$S_z|+\rangle = \frac{1}{2}|+\rangle \quad (\text{E.4})$$

$$S_z|-\rangle = -\frac{1}{2}|-\rangle \quad (\text{E.5})$$

$$(\text{E.6})$$

Si se introducen los operadores de Hubbard $X_{a,b}(j)$ en un sitio j

$$X_{+,-}|-\rangle = |+\rangle \quad (\text{E.7})$$

$$X_{-,+}|+\rangle = |-\rangle \quad (\text{E.8})$$

$$X_{+,+}|+\rangle = \frac{1}{2}|+\rangle \quad (\text{E.9})$$

$$X_{-,-}|-\rangle = -\frac{1}{2}|-\rangle \quad (\text{E.10})$$

$$(\text{E.11})$$

el Hamiltoniano E.1 se puede escribir como

$$\mathcal{H}_H = -J_H \sum_{\langle i,j \rangle} \left\{ \underbrace{X_{+,-}(i)X_{-,+}(j) + X_{+,-}(j)X_{-,+}(i)}_A + \frac{1}{4} \underbrace{(X_{+,+}(i)X_{-,-}(i))(X_{+,+}(j)X_{-,-}(j))}_B \right\}, \quad (\text{E.12})$$

Se resuelve en dos partes (*A* y *B*). Para esto, se tienen en cuenta las reglas de conmutación usuales para los operadores de Hubbard:

$$[X_{pq}(i), X_{rs}(j)]_{mp} = \delta_{ij} (\delta_{qr} X_{ps}(i) + \delta_{ps} X_{rq}(i)) \quad (\text{E.13})$$

E.1. Parte A

Para la parte *A* se reescriben los operadores $X_{+,-}(i) = X_{+,0}(i)X_{0,-}(i)$ y $X_{-,+}(j) = X_{-,0}(j)X_{0,+}(j)$ se pueden escribir los operadores de (E.12) como:

$$\begin{aligned} X_{+,-}(i)X_{-,+}(j) + X_{+,-}(j)X_{-,+}(i) = \\ X_{+,0}(i)X_{0,-}(i)X_{-,0}(j)X_{0,+}(j) + X_{+,0}(j)X_{0,-}(j)X_{-,0}(i)X_{0,+}(i) \end{aligned} \quad (\text{E.14})$$

Ahora haciendo una aproximación de campo medio

$$\begin{aligned} X_{+,-}(i)X_{-,+}(j) + X_{+,-}(j)X_{-,+}(i) = \\ \frac{1}{2} \{ X_{+,0}(i)X_{0,+}(j) \langle X_{0,-}(i)X_{-,0}(j) \rangle + X_{+,0}(j)X_{0,+}(i) \langle X_{0,-}(j)X_{-,0}(i) \rangle + \\ + X_{-,0}(i)X_{0,-}(j) \langle X_{0,+}(i)X_{+,0}(j) \rangle + X_{-,0}(j)X_{0,-}(i) \langle X_{0,+}(j)X_{+,0}(i) \rangle \} \end{aligned} \quad (\text{E.15})$$

si

$$\langle X_{0,\sigma}(j)X_{\sigma,0}(i) \rangle = \langle X_{0,\sigma}(i)X_{\sigma,0}(j) \rangle = \langle X_{0,\sigma}X_{\sigma,0} \rangle \quad (\text{E.16})$$

lo que significa (lado izq. de la igualdad) que se crea una partícula en el estado i con espín σ y desaparece una partícula con el mismo espín en el sitio j y (a la der.) se crea una partícula con espín sigma en el sitio j y desaparece en el sitio i . En promedio de las dos cantidades son iguales.

Entonces la ecuación (E.16) se puede reescribir

$$\begin{aligned} X_{+,-}(i)X_{-,+}(j) + X_{+,-}(j)X_{-,+}(i) = \\ \frac{1}{2} \{ [X_{+,0}(i)X_{0,+}(j) + X_{+,0}(j)X_{0,+}(i)] \langle X_{0,-}X_{-,0} \rangle + \\ + [X_{-,0}(i)X_{0,-}(j) + X_{-,0}(j)X_{0,-}(i)] \langle X_{0,+}X_{+,0} \rangle \} \end{aligned} \quad (\text{E.17})$$

ahora definiendo

$$\Gamma_{\sigma}(i, j) = \frac{1}{\sqrt{2}} (X_{\sigma,0}(i)X_{0,\sigma}(j) + X_{\sigma,0}(j)X_{0,\sigma}(i)) = \frac{2}{\sqrt{2}} X_{0,\sigma}(j)X_{\sigma,0}(i) \quad (\text{E.18})$$

$$\langle \Gamma_{\sigma}(i, j) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle X_{0,\sigma}(i)X_{\sigma,0}(j) \rangle + \langle X_{0,\sigma}(j)X_{\sigma,0}(i) \rangle) = \frac{2}{\sqrt{2}} \langle X_{0,\sigma}(j)X_{\sigma,0}(i) \rangle \quad (\text{E.19})$$

entonces el término

$$\begin{aligned} X_{+,0}(i)X_{0,+}(j) + X_{+,0}(j)X_{0,+}(i) &= \frac{1}{2} \left\{ \sqrt{2}\Gamma_+(i,j)\langle X_{0,-}(i)X_{-,0}(j) \rangle + \sqrt{2}\Gamma_-(i,j)\langle X_{0,+}(i)X_{+,0}(j) \rangle \right\} \\ &= \frac{1}{2} \left\{ \Gamma_+(i,j)\langle \Gamma_-(i,j) \rangle + \Gamma_-(i,j)\langle \Gamma_+(i,j) \rangle \right\} \end{aligned} \quad (\text{E.20})$$

$$= \frac{\sqrt{2}}{2} \sum_{\sigma} \Gamma_{\sigma}(i,j)\langle X_{0,\sigma}(i)X_{\sigma,0}(j) \rangle \quad (\text{E.21})$$

de la ecuación (E.12) se deduce que:

$$\begin{aligned} -J_H \sum_{\langle i,j \rangle} [X_{+,-}(i)X_{-,+}(j) + X_{+,-}(j)X_{-,+}(i)] &= \frac{-J_H\sqrt{2}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} \Gamma_{\sigma}(i,j)\langle X_{0,\sigma}(i)X_{\sigma,0}(j) \rangle \\ &= \frac{-J_H}{2} \sum_{i,j,\sigma} X_{i,\sigma,0}X_{j,0,\sigma}\langle X_{i,0,\sigma}X_{j,\sigma,0} \rangle \end{aligned} \quad (\text{E.22})$$

comparando con la parte A de ecuación (E.12)

$$H'_f = \sum_{j,i,\sigma} t_{i,j} X_{i,0,\sigma}^{\dagger} X_{j,0,\sigma} \quad (\text{E.23})$$

con

$$t_{i,j,\sigma} = \frac{-J_H}{2} \langle X_{i,0,\sigma} X_{j,\sigma,0} \rangle \quad (\text{E.24})$$

E.2. Parte B

$$\begin{aligned} (X_{++}(i) - X_{--}(i))(X_{++}(j) - X_{--}(j)) &= X_{++}(i)X_{++}(j) - X_{++}(i)X_{--}(j) \\ &\quad - X_{--}(i)X_{++}(j) + X_{--}(i)X_{--}(j) \end{aligned} \quad (\text{E.25})$$

usando aproximación de campo medio de la forma

$$X_{\sigma\sigma}(\alpha)X_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}(\alpha') = X_{\sigma\sigma}(\alpha)\langle X_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}(\alpha') \rangle + X_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}(\alpha')\langle X_{\sigma\sigma}(\alpha) \rangle - \langle X_{\sigma\sigma}(\alpha) \rangle \langle X_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}(\alpha') \rangle \quad (\text{E.26})$$

$$\begin{aligned} &X_{++}(i)X_{++}(j) - X_{++}(i)X_{--}(j) - X_{--}(i)X_{++}(j) + X_{--}(i)X_{--}(j) = \\ &= X_{++}(i)\langle X_{++}(j) \rangle + X_{++}(j)\langle X_{++}(i) \rangle - \langle X_{++}(i) \rangle \langle X_{++}(j) \rangle \\ &\quad - X_{++}(i)\langle X_{--}(j) \rangle - X_{--}(j)\langle X_{++}(i) \rangle + \langle X_{++}(i) \rangle \langle X_{--}(j) \rangle \\ &\quad - X_{--}(i)\langle X_{++}(j) \rangle - X_{++}(j)\langle X_{--}(i) \rangle + \langle X_{--}(i) \rangle \langle X_{++}(j) \rangle \\ &\quad + X_{--}(i)\langle X_{--}(j) \rangle + X_{--}(j)\langle X_{--}(i) \rangle - \langle X_{--}(i) \rangle \langle X_{--}(j) \rangle \end{aligned} \quad (\text{E.27})$$

agrupando

$$\begin{aligned}
& X_{++}(i)X_{++}(j) - X_{++}(i)X_{--}(j) - X_{--}(i)X_{++}(j) + X_{--}(i)X_{--}(j) = \\
= & (X_{++}(i) - X_{--}(i))\langle X_{++}(j) \rangle + (X_{++}(j) - X_{--}(j))\langle X_{++}(i) \rangle \\
& + (X_{--}(i) - X_{++}(i))\langle X_{--}(j) \rangle + (X_{--}(j) - X_{++}(j))\langle X_{--}(i) \rangle \\
& - \langle X_{++}(i) \rangle \langle X_{++}(j) \rangle + \langle X_{++}(i) \rangle \langle X_{--}(j) \rangle \\
& + \langle X_{--}(i) \rangle \langle X_{++}(j) \rangle - \langle X_{--}(i) \rangle \langle X_{--}(j) \rangle
\end{aligned} \tag{E.28}$$

si usáramos una aproximación de la forma que el producto de dos promedios fuese cero, entonces los últimos cuatro términos se cancelan.

Nota: *El término de interacción tipo Heisenberg es importante para estudiar sistemas de Heavy Fermions donde existe competición entre la interacción RKKY y el efecto Kondo, donde además la ocupación del sistema es $\langle n^f \rangle = \langle n^c \rangle = 1$ (límite Kondo) para el caso de los aislantes Kondo esta situación es diferente. La ocupación se encuentra en la región de valencia intermedia (VI) y la ocupación es $\langle n^f \rangle \approx 0,7$ para el caso de estudio de aislantes Kondo topológicos. Por otro lado, en los Heavy Fermions esta situación describe ordenamientos magnéticos a baja temperatura y los aislantes Kondo **NO** obtienen este ordenamiento magnético, siempre son paramagnéticos al menos no existe un reporte a la fecha (Junio 2017) que justifique lo contrario a muy bajas temperaturas. El término tipo Heisenberg que aparece en nuestro hamiltoniano, no se extiende por toda la red (como sí los estados localizados estuvieran fijos en el sistema) es netamente localizado y t_{ij} es un término de hopping.*

F. Obtención de multiplicadores de Lagrange

Los multiplicadores de Lagrange usados para la descripción del método *X-boson*, son obtenidos minimizando la función de energía libre y el potencial termodinámico para el modelo de la impureza de Anderson.

F.1. Potencial Termodinámico

$$\Omega = \bar{\Omega}_0 + \sum_{\mathbf{k}, \sigma, l=\pm} \ln(1 + e^{-\beta\omega_{\mathbf{k}, \sigma}(l)}), \quad (\text{F.1})$$

donde $\beta = (K_B T)^{-1}$ y $\omega_{\mathbf{k}, \sigma}(\pm)$ es la relación de dispersión obtenida por *tight-binding* descrita por

$$\omega_{\mathbf{k}, \sigma}(\pm) = \frac{1}{2}(\varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_f + D_\sigma \bar{E}_{\mathbf{k}}) \pm \sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_f - D_\sigma \bar{E}_{\mathbf{k}})^2 + 4V^2 \Delta^2 D_\sigma}, \quad (\text{F.2})$$

con $\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2t \sum_i^n \cos(k_i)$ la energía de los electrones de conducción + ε_f energía de los estados localizados, $D_\sigma = R + n_{ff}$ el numero de ocupación total, $\bar{E}_{\mathbf{k}} = \alpha \varepsilon_{\mathbf{k}}$ la energía entre los estados localizados, $\Delta^2 = 0,5 Tr[\Phi(\mathbf{k}) \cdot \Phi^\dagger(\mathbf{k})]$.

Para obtener el valor del parámetro Λ de la aproximación X-Boson para el MAP, se debe minimizar el potencial termodinámico Ω respecto a R

$$\frac{\partial \Omega}{\partial R} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma, l=\pm} \frac{e^{-\beta\omega_{\mathbf{k}, \sigma}(l)}}{1 + e^{-\beta\omega_{\mathbf{k}, \sigma}(l)}} \cdot \frac{\partial \omega_{\mathbf{k}, \sigma}(l)}{\partial R} \quad (\text{F.3})$$

$$= \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \frac{e^{-\beta\omega_{\mathbf{k}, \sigma}(+)}}{1 + e^{-\beta\omega_{\mathbf{k}, \sigma}(+)}} \left\{ \frac{1}{2} \bar{E}_{\mathbf{k}} + \left(\frac{1}{4} \right) \frac{2(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_f - D_\sigma \bar{E}_{\mathbf{k}})(-\bar{E}_{\mathbf{k}}) + 4V^2 \Delta^2}{\sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_f - D_\sigma \bar{E}_{\mathbf{k}})^2 + 4V^2 \Delta^2 D_\sigma}} \right\} \quad (\text{F.4})$$

$$+ \frac{e^{-\beta\omega_{\mathbf{k}, \sigma}(-)}}{1 + e^{-\beta\omega_{\mathbf{k}, \sigma}(-)}} \left\{ \frac{1}{2} \bar{E}_{\mathbf{k}} - \left(\frac{1}{4} \right) \frac{2(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_f - D_\sigma \bar{E}_{\mathbf{k}})(-\bar{E}_{\mathbf{k}}) + 4V^2 \Delta^2}{\sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_f - D_\sigma \bar{E}_{\mathbf{k}})^2 + 4V^2 \Delta^2 D_\sigma}} \right\} \quad (\text{F.5})$$

definiendo

$$NUM1 = 2(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_f - D_\sigma \bar{E}_{\mathbf{k}})(-\bar{E}_{\mathbf{k}}) + 4V^2\Delta^2 \quad (\text{F.6})$$

$$NUM = NUM1/2 = \alpha\varepsilon_{\mathbf{k}}(\varepsilon_{\mathbf{k}}\alpha D_\sigma - 1) + \varepsilon_f + 2V^2\Delta^2 \quad (\text{F.7})$$

y

$$RAIZ = \sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{k}}(1 - \alpha D_\sigma) - \varepsilon_f)^2 + 4V^2\Delta^2 D_\sigma} \quad (\text{F.8})$$

$$\frac{\partial\Omega}{\partial R} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{e^{-\beta\omega_{\mathbf{k},\sigma}(+)}}{1 + e^{-\beta\omega_{\mathbf{k},\sigma}(+)}} \left\{ \alpha\varepsilon_{\mathbf{k}} + \frac{NUM}{RAIZ} \right\} + \frac{e^{-\beta\omega_{\mathbf{k},\sigma}(-)}}{1 + e^{-\beta\omega_{\mathbf{k},\sigma}(-)}} \left\{ \alpha\varepsilon_{\mathbf{k}} - \frac{NUM}{RAIZ} \right\} \quad (\text{F.9})$$

además,

$$\frac{e^{-\beta\omega_{\mathbf{k},\sigma}(+)}}{1 + e^{-\beta\omega_{\mathbf{k},\sigma}(+)}} \cdot \frac{e^{\beta\omega_{\mathbf{k},\sigma}(+)}}{e^{\beta\omega_{\mathbf{k},\sigma}(+)}} = \frac{1}{1 + e^{\beta\omega_{\mathbf{k},\sigma}(+)}} = n_f(+)$$

$$\frac{e^{-\beta\omega_{\mathbf{k},\sigma}(-)}}{1 + e^{-\beta\omega_{\mathbf{k},\sigma}(-)}} \cdot \frac{e^{\beta\omega_{\mathbf{k},\sigma}(-)}}{e^{\beta\omega_{\mathbf{k},\sigma}(-)}} = \frac{1}{1 + e^{\beta\omega_{\mathbf{k},\sigma}(-)}} = n_f(-)$$

$$(\text{F.12})$$

$$\frac{\partial\Omega}{\partial R} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\sigma} n_f(+)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \alpha\varepsilon_{\mathbf{k}} [n_f(+)$$

$$0 = \frac{\partial\Omega}{\partial R} + \Lambda \quad (\text{F.15})$$

$$0 = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \alpha\varepsilon_{\mathbf{k}} [n_f(+)$$

$$(\text{F.17})$$

$$2\Lambda = - \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left(\alpha\varepsilon_{\mathbf{k}} [n_f(+)$$

$$\Lambda = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \alpha\varepsilon_{\mathbf{k}} [n_f(+)$$

para el caso de $\alpha = 0$ (eliminamos la interacción entre los estados localizados a primeros vecinos)

$$\begin{aligned} \Lambda_{\alpha=0} &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\sigma} [n_f(+)$$

G. Números de ocupación

Determinación de los números de ocupación a partir de las funciones de Green del modelo *x-boson*. La función de Green para los electrones de conducción descrita en (2.5)

$$G^c(z) = \frac{-(z - \tilde{\varepsilon}^f)}{(z - \tilde{\varepsilon}^f)(z - \varepsilon_{\mathbf{k}}) - V^2 D_\sigma} \quad (\text{G.1})$$

$$= \frac{-(\omega' + i\eta - \tilde{\varepsilon}^f)}{(\omega' + i\eta - \tilde{\varepsilon}^f)(\omega' + i\eta - \varepsilon_{\mathbf{k}}) - V^2 D_\sigma} \quad (\text{G.2})$$

$$= \frac{A}{\omega' - \omega_+ + i\eta} + \frac{B}{\omega' - \omega_- + i\eta} \quad (\text{G.3})$$

con A y B coeficientes determinados por fracciones parciales

$$A = \frac{(\omega_+ - \tilde{\varepsilon}^f)}{\omega_+ - \omega_-} \quad (\text{G.4})$$

$$B = \frac{(\tilde{\varepsilon}^f - \omega_-)}{\omega_+ - \omega_-} \quad (\text{G.5})$$

usando la identidad

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{x + i\eta} = P(x^{-1}) \mp i\pi\delta(x) \quad (\text{G.6})$$

para el cálculo de los números de ocupación n_c

$$n_c = \frac{-1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega n_F(\omega) \text{Im}(G_c(\omega)) \quad (\text{G.7})$$

$$= \frac{-1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega n_F(\omega) \text{Im} \left(\frac{A}{\underbrace{\omega' - \omega_+ + i\eta}_x} + \frac{B}{\underbrace{\omega' - \omega_- + i\eta}_x} \right) \quad (\text{G.8})$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' n_F(\omega') (A\delta(\omega' - \omega_+) + B\delta(\omega' - \omega_-)) \quad (\text{G.9})$$

$$= n_F(\omega_+)A + n_F(\omega_-)B \quad (\text{G.10})$$

$$A = \frac{D_\sigma \cdot V}{\sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon^f)^2 + 4V^2 D_\sigma \Delta^2}}; \quad B = \frac{-D_\sigma \cdot V}{\sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon^f)^2 + 4V^2 D_\sigma \Delta^2}} \quad (\text{G.11})$$

$\Delta^2 = 4(\sin^2(k_x) + \sin^2(k_y))$. n_F corresponde a la función de distribución de Fermi-Dirac.

Publicaciones y trabajos no publicados.

Del trabajo realizado en esta tesis se obtuvieron las siguientes publicaciones

- E Ramos, R Franco, J Silva-Valencia, M E Foglio, and M S Figueira. X-boson cumulant approach to the topological kondo insulators. *Journal of Physics: Conference Series*, 568(5):052007, 2014.
- E. Ramos, J. Silva-Valencia, R. Franco, E.C. Siqueira, and M.S. Figueira. Spin-current Seebeck effect in an interacting quantum dot: Atomic approximation for the Anderson-impurity model. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, 74:334–339, 2015.
- E Ramos, R Franco, J Silva-Valencia, M E Foglio, and M S Figueira. The role of short-range magnetic correlations in the gap opening of topological kondo insulators. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 29 (34):345601, jul 2017.

Algunos trabajos aún no publicados o en proceso de publicación

- E Ramos, R Franco, J Silva-Valencia, M E Foglio, and M S Figueira. SmB6 in-gap states encoded inside the hybridization. Presentado en el March Meeting 2019. Paper en preparación.
- E Ramos, R Franco, J Silva-Valencia, M E Foglio, and M S Figueira. In gap states in topological Kondo insulators: Optical properties evidence. Presentado en el March Meeting 2019. Paper en preparación.
- E Ramos, R Franco, J Silva-Valencia, M E Foglio, and M S Figueira. Thermoelectrical and Transport Properties in Topological Kondo Insulators. Paper en preparación.
- E Ramos, R Franco, J Silva-Valencia, M E Foglio, and M S Figueira. Optical conductivity in Topological kondo Insulators. Paper en preparación.

Bibliografía

- [1] D.J. Kim, J. Xia, and Z. Fisk. Topological surface state in the Kondo insulator samarium hexaboride. *Nature Materials*, 13(5):466–470, 2014.
- [2] Stephen R. Boona, Roberto C. Myers, and Joseph P. Heremans. Spin caloritronics. *Energy Environ. Sci.*, 7:885–910, 2014.
- [3] Zhi–Cheng Yang, Qing-Feng Sun, and X C Xie. Spin–current Seebeck effect in quantum dot systems. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 26(4):045302, 2014.
- [4] Vishal Ranjan Ivan J. Vera-Marun and Bart J. van Wees. Nonlinear detection of spin currents in graphene with non-magnetic electrodes. *Nature Physics*, 8:313–316, Jan 2012.
- [5] A. Soumyanarayanan Harris Pirie, Yu Liu and Pengcheng Chen. Imaging emergent heavy Dirac Fermions of a topological Kondo insulator. 2018.
- [6] N. Alidoust, A. Alexandradinata, S.-Y. Xu, I. Belopolski, S. K. Kushwaha, M. Zeng, M. Neupane, G. Bian, C. Liu, D. S. Sanchez, P. P. Shibayev, H. Zheng, L. Fu, A. Bansil, H. Lin, R. J. Cava, and M. Zahid Hasan. A new form of (unexpected) Dirac Fermions in the strongly-correlated cerium monpnictides. *ArXiv e-prints*, April 2016.
- [7] Pier Paolo Baruselli and Matthias Vojta. Scanning tunneling spectroscopy and surface quasiparticle interference in models for the strongly correlated topological insulators SmB_6 and PuB_6 . *Phys. Rev. B*, 90:201106, Nov 2014.
- [8] C.-J. Kang, J. Kim, K. Kim, J. Kang, J.D. Denlinger, and B.I. Min. Band symmetries of mixed-valence topological insulator: SmB_6 . *Journal of the Physical Society of Japan*, 84(2), 2015.
- [9] Victor Alexandrov, Maxim Dzero, and Piers Coleman. Cubic topological Kondo insulators. *Phys. Rev. Lett.*, 111:226403, Nov 2013.
- [10] Tetsuya Takimoto. SmB_6 : A promising candidate for a topological insulator. *Journal of the Physical Society of Japan*, 80(12):123710, 2011.

-
- [11] Lu F. Correlated topological insulators with mixed valence. *Phys. Rev. Lett.*, 110:096401, 2013.
- [12] L. Jiao, S. Rößler, D.J. Kim, L.H. Tjeng, Z. Fisk, F. Steglich, and S. Wirth. Additional energy scale in SmB_6 at low-temperature. *Nature Communications*, 7, 2016.
- [13] J. Derr, G. Knebel, D. Braithwaite, B. Salce, J. Flouquet, K. Flachbart, S. Gabáni, and N. Shitsevalova. From unconventional insulating behavior towards conventional magnetism in the intermediate-valence compound SmB_6 . *Phys. Rev. B*, 77:193107, May 2008.
- [14] S. V. Dordevic, D. N. Basov, N. R. Dilley, E. D. Bauer, and M. B. Maple. Hybridization gap in heavy Fermion compounds. *Phys. Rev. Lett.*, 86:684–687, Jan 2001.
- [15] M. Neupane, N. Alidoust, S.-Y. Xu, T. Kondo, Y. Ishida, D.J. Kim, C. Liu, I. Belopolski, Y.J. Jo, T.-R. Chang, H.-T. Jeng, T. Durakiewicz, L. Balicas, H. Lin, A. Bansil, S. Shin, Z. Fisk, and M.Z. Hasan. Surface electronic structure of the topological Kondo-insulator candidate correlated electron system SmB_6 . *Nature Communications*, 4, 2013.
- [16] Yazhou Zhou, Qi Wu, Priscila F.S. Rosa, Rong Yu, Jing Guo, Wei Yi, Shan Zhang, Zhe Wang, Honghong Wang, Shu Cai, Ke Yang, Aiguo Li, Zheng Jiang, Shuo Zhang, Xiangjun Wei, Yuying Huang, Peijie Sun, Yi feng Yang, Zachary Fisk, Qimiao Si, Zhongxian Zhao, and Liling Sun. Quantum phase transition and destruction of Kondo effect in pressurized SmB_6 . *Science Bulletin*, 62(21):1439 – 1444, 2017.
- [17] M. Z. Hasan and C. L. Kane. Colloquium: Topological insulators. *Rev. Mod. Phys.*, 82:3045–3067, Nov 2010.
- [18] Xiao-Liang Qi and Shou-Cheng Zhang. Topological insulators and superconductors. *Rev. Mod. Phys.*, 83:1057–1110, Oct 2011.
- [19] Moore J.E. The birth of topological insulators. *Nature*, 464:194, 2010.
- [20] B.A. Bernevig, T.L. Hughes, and S.-C. Zhang. Quantum spin Hall effect and topological phase transition in HgTe quantum wells. *Science*, 314(5806):1757–1761, 2006.
- [21] H. Zhang, C.-X. Liu, X.-L. Qi, X. Dai, Z. Fang, and S.-C. Zhang. Topological insulators in Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 and Sb_2Te_3 with a single Dirac cone on the surface. *Nature Physics*, 5(6):438–442, 2009.
- [22] C.L. Kane and E.J. Mele. \mathbb{Z}_2 topological order and the quantum spin Hall effect. *Physical Review Letters*, 95(14), 2005.

-
- [23] Liang Fu, C. L. Kane, and E. J. Mele. Topological insulators in three dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 98:106803, Mar 2007.
- [24] J M Kosterlitz and D J Thouless. Long range order and metastability in two dimensional solids and superfluids. (application of dislocation theory). *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 5(11):L124, 1972.
- [25] J M Kosterlitz and D J Thouless. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 6(7):1181, 1973.
- [26] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs. Quantized Hall conductance in a two-dimensional periodic potential. *Phys. Rev. Lett.*, 49:405–408, Aug 1982.
- [27] F.D.M. Haldane. Continuum dynamics of the 1-D Heisenberg antiferromagnet: Identification with the O(3) nonlinear sigma model. *Physics Letters A*, 93(9):464 – 468, 1983.
- [28] F. D. M. Haldane. Nonlinear field theory of large-spin Heisenberg antiferromagnets: Semiclassically quantized solitons of the one-dimensional easy-axis Néel state. *Phys. Rev. Lett.*, 50:1153–1156, Apr 1983.
- [29] X.-L. Qi, T.L. Hughes, and S.-C. Zhang. Topological field theory of time-reversal invariant insulators. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 78(19), 2008.
- [30] Davide Castelvecchi. The strange topology that is reshaping physics. *Nature*, 547:272–274, 2017.
- [31] Nature Publishing Group. All shook up over topology. *Nature*, 547:257–278, 2017.
- [32] Gregory A. Fiete. Materials science: Chemistry and physics happily wed. *Nature*, 547(7663):287–288, July 2017.
- [33] Ching-Kai Chiu, Jeffrey C. Y. Teo, Andreas P. Schnyder, and Shinsei Ryu. Classification of topological quantum matter with symmetries. *Rev. Mod. Phys.*, 88:035005, Aug 2016.
- [34] S. Murakami, N. Nagaosa, and S.-C. Zhang. Dissipationless quantum spin current at room temperature. *Science*, 301(5638):1348–1351, 2003.
- [35] Shuichi Murakami, Naoto Nagaosa, and Shou-Cheng Zhang. SU(2) non-abelian holonomy and dissipationless spin current in semiconductors. *Phys. Rev. B*, 69:235206, Jun 2004.

- [36] J. E. Moore and L. Balents. Topological invariants of time-reversal-invariant band structures. *Phys. Rev. B*, 75:121306, Mar 2007.
- [37] Markus König, Hartmut Buhmann, Laurens W. Molenkamp, Taylor Hughes, Chao-Xing Liu, Xiao-Liang Qi, and Shou-Cheng Zhang. The quantum spin Hall effect: Theory and experiment. *Journal of the Physical Society of Japan*, 77(3):031007, 2008.
- [38] Ivan Knez, Rui-Rui Du, and Gerard Sullivan. Evidence for helical edge modes in inverted InAs/GaSb quantum wells. *Phys. Rev. Lett.*, 107:136603, Sep 2011.
- [39] Chetan Nayak, Steven H. Simon, Ady Stern, Michael Freedman, and Sankar Das Sarma. Non-abelian anyons and topological quantum computation. *Rev. Mod. Phys.*, 80:1083–1159, Sep 2008.
- [40] Steve M. Young and Charles L. Kane. Dirac semimetals in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 115:126803, Sep 2015.
- [41] Xiangang Wan, Ari M. Turner, Ashvin Vishwanath, and Sergey Y. Savrasov. Topological semimetal and Fermi-arc surface states in the electronic structure of pyrochlore iridates. *Phys. Rev. B*, 83:205101, May 2011.
- [42] Kim D.J. Surface Hall effect and nonlocal transport in SmB₆: Evidence for surface conduction. *Sci. Rep.*, 3:3150, 2013.
- [43] Peter S. Riseborough. Heavy Fermion semiconductors. *Advances in Physics*, 49(3):257–320, 2000.
- [44] Maxim Dzero, Kai Sun, Victor Galitski, and Piers Coleman. Topological Kondo insulators. *Phys. Rev. Lett.*, 104:106408, Mar 2010.
- [45] Maxim Dzero, Kai Sun, Piers Coleman, and Victor Galitski. Theory of topological Kondo insulators. *Phys. Rev. B*, 85:045130, Jan 2012.
- [46] V. Dzero, M. and Galitski. A new exotic state in an old material: a tale of SmB₆. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 117(3):499–507, 2013.
- [47] Minh-Tien Tran, Tetsuya Takimoto, and Ki-Seok Kim. Phase diagram for a topological Kondo insulating system. *Phys. Rev. B*, 85:125128, Mar 2012.
- [48] Jan Werner and Fakher F. Assaad. Interaction-driven transition between topological states in a Kondo insulator. *Phys. Rev. B*, 88:035113, Jul 2013.
- [49] R.M. Martin and J.W. Allen. Theory of mixed valence: Metals or small gap insulators (invited). *Journal of Applied Physics*, 50(B11):7561–7566, 1979.

-
- [50] J.W. Allen, L.I. Johansson, I. Lindau, and S.B. Hagstrom. Surface mixed valence in Sm and SmB₆. *Physical Review B*, 21(4):1335–1343, 1980.
- [51] P. Coleman, P.W. Anderson, and T.V. Ramakrishnan. Theory for the anomalous Hall constant of mixed-valence systems. *Physical Review Letters*, 55(4):414–417, 1985.
- [52] F. Lu, J. Zhao, H. Weng, Z. Fang, and X. Dai. Correlated topological insulators with mixed valence. *Physical Review Letters*, 110(9), 2013.
- [53] P A Alekseev, J M Mignot, J Rossat-Mignod, V N Lazukov, I P Sadikov, E S Konovalova, and Yu B Paderno. Magnetic excitation spectrum of mixed-valence SmB₆ studied by neutron scattering on a single crystal. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 7(2):289–305, jan 1995.
- [54] D. Chowdhury, I. Sodemann, and T. Senthil. Mixed-valence insulators with neutral Fermi surfaces. *Nature Communications*, 9(1), 2018.
- [55] P.S. Savchenkov, P.A. Alekseev, A. Podlesnyak, A.I. Kolesnikov, and K.S. Nemkovski. Intermediate-valence state of the Sm and Eu in SmB₆ and EuCu₂Si₂: Neutron spectroscopy data and analysis. *Journal of Physics Condensed Matter*, 30(5), 2018.
- [56] Piers Coleman. New approach to the mixed-valence problem. *Phys. Rev. B*, 29:3035–3044, Mar 1984.
- [57] N.W. Ashcroft and N.D. Mermin. *Solid State Physics*. Saunders College, Philadelphia, 1976.
- [58] Charles Kittel. *Introduction to Solid State Physics*. John Wiley and Sons, Inc., New York, 6th edition, 1986.
- [59] Lars Onsager. Reciprocal relations in irreversible processes. i. *Phys. Rev.*, 37:405–426, Feb 1931.
- [60] E. Ramos, R. Franco, J. Silva-Valencia, and M.S. Figueira. Thermoelectric transport properties of a t-coupled quantum dot: Atomic approach for the finite U case. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, 64:39–44, 2014.
- [61] M. Pfeiffer, A. Beyer, T. Fritz, and K. Leo. Controlled doping of phthalocyanine layers by cosublimation with acceptor molecules: A systematic Seebeck and conductivity study. *Applied Physics Letters*, 73(22):3202–3204, 1998.
- [62] Robert R. Heikes and Roland W. Ure. *Thermoelectricity: Science and Engineering*. Interscience Publishers, Inc., New York, N.Y., 1961.
- [63] B W Van Oudheusden. Silicon thermal flow sensor with a two-dimensional direction sensitivity. *Measurement Science and Technology*, 1(7):565, 1990.

- [64] S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnár, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova, and D. M. Treger. Spintronics: A spin-based electronics vision for the future. *Science*, 294(5546):1488–1495, 2001.
- [65] K.P. Wójcik and I. Weymann. Strong spin Seebeck effect in Kondo T-shaped double quantum dots. *Journal of Physics Condensed Matter*, 29(5), 2017.
- [66] H. Yu, S.D. Brechet, and J.-P. Ansermet. Spin caloritronics, origin and outlook. *Physics Letters, Section A: General, Atomic and Solid State Physics*, 381(9):825–837, 2017.
- [67] N. Okuma, M.R. Masir, and A.H. MacDonald. Theory of the spin-Seebeck effect at a topological-insulator/ferromagnetic-insulator interface. *Physical Review B*, 95(16), 2017.
- [68] M. Collet, L. Soumah, P. Bortolotti, M. Muñoz, V. Cros, and A. Anane. Spin Seebeck effect in nanometer-thick YIG micro-fabricated strips. *AIP Advances*, 7(5), 2017.
- [69] T Lobo, M S Figueira, and M E Foglio. The atomic approach to the Anderson model for the finite U case: application to a quantum dot. *Nanotechnology*, 21(27):274007, 2010.
- [70] M. E. Foglio, T. Lobo, and M. S. Figueira. General derivation of the Green’s functions for the atomic approach of the Anderson model: application to a single electron transistor (set). *AIP Advances*, 2(3):032139, 2012.
- [71] H. Haug and A.P. Jauho. *Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors*. Springer Series in Solid-State Sciences. Springer Berlin Heidelberg, 1998.
- [72] Yigal Meir and Ned S. Wingreen. Landauer formula for the current through an interacting electron region. *Phys. Rev. Lett.*, 68:2512–2515, Apr 1992.
- [73] S.G. Ovchinnikov, V.V. Val’kov, and V.V. Val’kov. *Hubbard Operators in the Theory of Strongly Correlated Electrons*. Imperial College Press, 2004.
- [74] R. Franco, M. S. Figueira, and M. E. Foglio. X -boson cumulant approach to the periodic Anderson model. *Phys. Rev. B*, 66:045112, Jul 2002.
- [75] F. Steglich, C. Geibel, K. Gloos, G. Olesch, C. Schank, C. Wassilew, A. Loidl, A. Krimmel, and G. R. Stewart. Heavy Fermions: Typical phenomena and recent developments. *Journal of Low Temperature Physics*, 95(1):3–22, 1994.
- [76] W.K. Park, L. Sun, A. Noddings, D.-J. Kim, Z. Fisk, and L.H. Greene. Topological surface states interacting with bulk excitations in the Kondo insulator SmB₆ revealed via planar tunneling spectroscopy. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 113(24):6599–6604, 2016.

- [77] J.-M. Mignot, P. A. Alekseev, K. S. Nemkovski, L.-P. Regnault, F. Iga, and T. Takabatake. Evidence for short-range antiferromagnetic fluctuations in Kondo-insulating YbB_{12} . *Phys. Rev. Lett.*, 94:247204, Jun 2005.
- [78] P. A. Alekseev, V. N. Lazukov, K. S. Nemkovskii, and I. P. Sadikov. Magnetic excitations in systems with a nonmagnetic ground state and valence fluctuations. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 111(2):285–291, 2010.
- [79] T J Sato, H Kadowaki, H Yoshizawa, T Ekino, T Takabatake, H Fujii, L P Regnault, and Y Isikawa. Neutron scattering study of antiferromagnetic correlations in the Kondo semiconductor CeSn . *Journal of Physics: Condensed Matter*, 7(41):8009, 1995.
- [80] A S Mishchenko and K A Kikoin. Lattice dynamics of rare-earth semiconductors with unstable valence. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 3(32):5937–5954, aug 1991.
- [81] A. Barla, J. Derr, J. P. Sanchez, B. Salce, G. Lapertot, B. P. Doyle, R. Rüffer, R. Lengsdorf, M. M. Abd-Elmeguid, and J. Flouquet. High-pressure ground state of SmB_6 : Electronic conduction and long range magnetic order. *Phys. Rev. Lett.*, 94:166401, Apr 2005.
- [82] J Derr, G Knebel, G Lapertot, B Salce, M-A Méasson, and J Flouquet. Valence and magnetic ordering in intermediate valence compounds: TmSe versus SmB_6 . *Journal of Physics: Condensed Matter*, 18(6):2089, 2006.
- [83] Nicholas P. Butch, Johnpierre Paglione, Paul Chow, Yuming Xiao, Chris A. Marianetti, Corwin H. Booth, and Jason R. Jeffries. Pressure-resistant intermediate valence in the Kondo insulator SmB_6 . *Phys. Rev. Lett.*, 116:156401, Apr 2016.
- [84] P.P. Baruselli and M. Vojta. Surface reconstruction in a tight-binding model for the topological Kondo insulator SmB_6 . *2D Materials*, 2(4), 2015.
- [85] Piers Coleman. New approach to the mixed-valence problem. *Phys. Rev. B*, 29:3035–3044, Mar 1984.
- [86] S. Doniach and E.H. Sondheimer. *Green's Functions for Solid State Physicists*. Imperial College Press, 1998.
- [87] Markus Legner, Andreas Rüegg, and Manfred Sigrist. Topological invariants, surface states, and interaction-driven phase transitions in correlated Kondo insulators with cubic symmetry. *Phys. Rev. B*, 89:085110, Feb 2014.
- [88] Raymond Frésard, Johann Kroha, and Peter Wölfle. *The Pseudoparticle Approach to Strongly Correlated Electron Systems*. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2012.

- [89] Lizardo H.C.M. Nunes, M.S. Figueira, and M.E. Foglio. Study of the Kondo and high-temperature limits of the slave-boson and x-boson methods. *Physics Letters A*, 358(4):313 – 321, 2006.
- [90] A. Bouvet, T. Kasuya, M. Bonnet, L. P. Regnault, J. Rossat-Mignod, F. Iga, B.åk@, and A. Severing. Magnetic excitations observed by means of inelastic neutron scattering in polycrystalline YB_{12} . *Journal of Physics Condensed Matter*, 10:5667–5677, June 1998.
- [91] Fuhrman W.T. Interaction driven subgap spin exciton in the Kondo insulator SmB_6 . *Phys. Rev. Lett.*, 114:036401, 2015.
- [92] J.-G. Park, D. T. Adroja, K. A. McEwen, Y. J. Bi, and J. Kulda. Possible crystal-field excitation in single-crystal $CeNiSn$. *Phys. Rev. B*, 58:3167–3171, Aug 1998.
- [93] M. Legner, A. Rüegg, and M. Sigrist. Surface-state spin textures and mirror Chern numbers in topological Kondo insulators. *Physical Review Letters*, 115(15), 2015.
- [94] Luo Y. Heavy surface state in a possible topological Kondo insulator: Magnetothermoelectric transport on the (011) plane of SmB_6 . *Phys. Rev. B*, 91:075130, 2015.
- [95] Hiroaki Ikeda and Kazumasa Miyake. A theory of anisotropic semiconductor of heavy Fermions. *Journal of the Physical Society of Japan*, 65(6):1769–1781, 1996.
- [96] Juana Moreno and P. Coleman. Gap-anisotropic model for the narrow-gap Kondo insulators. *Phys. Rev. Lett.*, 84:342–345, Jan 2000.
- [97] Akari Takayama. *Basic Principle of Photoemission Spectroscopy and Spin Detector*, pages 15–30. Springer Japan, Tokyo, 2015.
- [98] Z. Fisk, J.L. Sarrao, J.D. Thompson, D. Mandrus, M.F. Hundley, A. Miglioni, B. Bucher, Z. Schlesinger, G. Aeppli, E. Bucher, J.F. DiTusa, C.S. Oglesby, H-R. Ott, P.C. Canfield, and S.E. Brown. Kondo insulators. *Physica B: Condensed Matter*, 206-207(Supplement C):798 – 803, 1995.
- [99] A. Severing, J. D. Thompson, P. C. Canfield, Z. Fisk, and P. Riseborough. Gap in the magnetic excitation spectrum of $Ce_3Bi_4Pt_3$. *Phys. Rev. B*, 44:6832–6837, Oct 1991.
- [100] J. C. Nickerson, R. M. White, K. N. Lee, R. Bachmann, T. H. Geballe, and G. W. Hull. Physical properties of SmB_6 . *Phys. Rev. B*, 3:2030–2042, Mar 1971.
- [101] Richard M. Martin and J. W. Allen. Theory of mixed valence: Metals or small gap insulators (invited). *Journal of Applied Physics*, 50(B11):7561–7566, 1979.

- [102] H Kumigashira, T Sato, T Yokoya, T Takahashi, S Yoshii, and M Kasaya. Pseudogap formation in Kondo insulators cerhsb and cerhas studied by ultrahigh-resolution photoemission spectroscopy. *Physica B: Condensed Matter*, 281-282:284 – 285, 2000.
- [103] J. C. Cooley, M. C. Aronson, Z. Fisk, and P. C. Canfield. SmB₆: Kondo insulator or exotic metal. *Phys. Rev. Lett.*, 74:1629–1632, Feb 1995.
- [104] J. W. Allen. Foreward for special issue of philosophical magazine on: topological correlated insulators and SmB₆. *Philosophical Magazine*, 96(31):3227–3238, 2016.
- [105] G. Li, Z. Xiang, F. Yu, T. Asaba, B. Lawson, P. Cai, C. Tinsman, A. Berkley, S. Wolgast, Y.S. Eo, D.-J. Kim, C. Kurdak, J.W. Allen, K. Sun, X.H. Chen, Y.Y. Wang, Z. Fisk, and L. Li. Two-dimensional Fermi surfaces in Kondo insulator SmB₆. *Science*, 346(6214):1208–1212, 2014.
- [106] Jiang J. Observation of possible topological in-gap surface states in the Kondo insulator SmB₆ by photoemission. *Nat. Commun.*, 4:3010, 2013.
- [107] Schlottmann P. Quantum oscillations in the surface states of topological Kondo insulators. *Phil. Mag.*, page 1, 2016.
- [108] P. Hlawenka, K. Siemensmeyer, E. Weschke, A. Varykhalov, J. Sánchez-Barriga, N.Y. Shitsevalova, A.V. Dukhnenko, V.B. Filipov, S. Gabáni, K. Flachbart, O. Rader, and E.D.L. Rienks. Samarium hexaboride is a trivial surface conductor. *Nature Communications*, 9(1), 2018.
- [109] J G Park, M Ocko, and B R Cole. Thermopower studies of (ce,u)nisn. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 6(49):L781, 1994.
- [110] A.J. Arko, J.J. Joyce, R.R. Blyth, P.C. Canfield, Joe Thompson, R.J. Bartlett, Zachary Fisk, J Lawrence, J Tang, and Peter Riseborough. Photoelectron spectroscopy in heavy Fermions: Inconsistencies with the Kondo model. 09 1992.
- [111] Y. Takeda, M. Arita, H. Sato, K. Shimada, H. Namatame, M. Taniguchi, K. Katoh, F. Iga, and T. Takabatake. High-resolution and low-temperature photoemission study of a Kondo insulator. *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, 88-91:391 – 394, 1998.
- [112] T. Susaki, Y. Takeda, M. Arita, K. Mamiya, A. Fujimori, K. Shimada, H. Namatame, M. Taniguchi, N. Shimizu, F. Iga, and T. Takabatake. Temperature-dependent high-resolution photoemission study of the Kondo insulator YbB₁₂. *Phys. Rev. Lett.*, 82:992–995, Feb 1999.

- [113] Y. Takeda, M. Arita, M. Higashiguchi, K. Shimada, H. Namatame, M. Taniguchi, F. Iga, and T. Takabatake. High-resolution photoemission study of the temperature-dependent c - f hybridization gap in the Kondo semiconductor YbB_{12} . *Phys. Rev. B*, 73:033202, Jan 2006.
- [114] P. Nyhus, S. L. Cooper, Z. Fisk, and J. Sarrao. Low-energy excitations of the correlation-gap insulator SmB_6 : a light-scattering study. *Phys. Rev. B*, 55:12488–12496, May 1997.
- [115] T. Nanba, H. Ohta, M. Motokawa, S. Kimura, S. Kunii, and T. Kasuya. Gap state of SmB_6 . *Physica B: Condensed Matter*, 186-188:440 – 443, 1993.
- [116] Hidetoshi Miyazaki, Tetsuya Hajiri, Takahiro Ito, Satoru Kunii, and Shin-ichi Kimura. Momentum-dependent hybridization gap and dispersive in-gap state of the Kondo semiconductor SmB_6 . *Phys. Rev. B*, 86:075105, Aug 2012.
- [117] Xu N. Spin- and angle-resolved photoemission on the topological Kondo insulator candidate: SmB_6 . *J. Phys. Condens. Matter*, 28:363001, 2016.
- [118] S.J. Yamamoto and Q. Si. Global phase diagram of the Kondo lattice: From heavy Fermion metals to Kondo insulators. *Journal of Low Temperature Physics*, 161(1-2):233–262, 2010.
- [119] Q. Si, J.H. Pixley, E. Nica, S.J. Yamamoto, P. Goswami, R. Yu, and S. Kirchner. Kondo destruction and quantum criticality in Kondo lattice systems. *Journal of the Physical Society of Japan*, 83(6), 2014.
- [120] Peter S Riseborough. Spin excitons in heavy Fermion semiconductors. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 226–230, Part 1:127 – 128, 2001.
- [121] G. A. Kapilevich, P. S. Riseborough, A. X. Gray, M. Gulacsi, Tomasz Durakiewicz, and J. L. Smith. Incomplete protection of the surface weyl cones of the Kondo insulator SmB_6 : Spin exciton scattering. *Phys. Rev. B*, 92:085133, Aug 2015.
- [122] E Ramos, R Franco, J Silva-Valencia, M E Foglio, and M S Figueira. The role of short-range magnetic correlations in the gap opening of topological Kondo insulators. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 29(34):345601, jul 2017.
- [123] Wolgast S. Low-temperature surface conduction in the Kondo insulator SmB_6 . *Phys. Rev. B*, 88:180405, 2013.
- [124] M. S. Figueira and R. Franco. Low temperature properties of the Kondo insulator FeSi . *The European Physical Journal B*, 58(1):1–10, 2007.

- [125] K. Hagiwara, Y. Ohtsubo, M. Matsunami, S.-I. Ideta, K. Tanaka, H. Miyazaki, J.E. Rault, P. Le Fèvre, F. Bertran, A. Taleb-Ibrahimi, R. Yukawa, M. Kobayashi, K. Horiba, H. Kumigashira, K. Sumida, T. Okuda, F. Iga, and S.-I. Kimura. Surface Kondo effect and non-trivial metallic state of the Kondo insulator YbB_{12} . *Nature Communications*, 7, 2016.
- [126] T. Caldwell, A. P. Reyes, W. G. Moulton, P. L. Kuhns, M. J. R. Hoch, P. Schlottmann, and Z. Fisk. High-field suppression of in-gap states in the Kondo insulator SmB_6 . *Phys. Rev. B*, 75(7):075106, February 2007.
- [127] Peter S. Riseborough. Collapse of the coherence gap in Kondo semiconductors. *Phys. Rev. B*, 68:235213, Dec 2003.
- [128] T. A. Costi, J. Kroha, and P. Wölfle. Spectral properties of the Anderson impurity model: Comparison of numerical-renormalization-group and noncrossing-approximation results. *Phys. Rev. B*, 53:1850–1865, Jan 1996.
- [129] R. Franco, J. Silva-Valencia, and M. S. Figueira. The low temperature spectral weight transfer problem in Kondo insulators. *The European Physical Journal B*, 67(2):159–167, 2009.
- [130] Pegor Aynajian, Eduardo H. Da Silva Neto, András Gyenis, Ryan E. Baumbach, J. D. Thompson, Zachary Fisk, Eric D. Bauer, and Ali Yazdani. Visualizing heavy Fermions emerging in a quantum critical Kondo lattice. *Nature*, 486(7402):201–206, 6 2012.
- [131] Jeremy Figgins and Dirk K. Morr. Differential conductance and quantum interference in Kondo systems. *Phys. Rev. Lett.*, 104:187202, May 2010.
- [132] Subir Sachdev, Max A Metlitski, and Matthias Punk. Antiferromagnetism in metals: from the cuprate superconductors to the heavy Fermion materials. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 24(29):294205, jul 2012.
- [133] M Hartstein, W H. Toews, Y.-T Hsu, B Zeng, X Chen, Monica Hatnean, Q R. Zhang, S Nakamura, A S. Padgett, Gilles Rodway-Gant, Joel Berk, M K. Kingston, G H. Zhang, M K. Chan, S Yamashita, T Sakakibara, Y Takano, J.-H Park, L Balicas, and Suchitra E. Sebastian. Fermi surface in the absence of a Fermi liquid in the Kondo insulator SmB_6 . *Nature Physics*, 14, 10 2017.
- [134] S. Gabáni, K. Flachbart, E. Konovalova, M. Orendác, Y. Paderno, V. Pavlík, and J. Sebek. Properties of the in-gap states in SmB_6 . *Solid State Communications*, 117:641–644, March 2001.
- [135] M. E. Foglio, T. Lobo, and M. S. Figueira. Green’s Functions for the Anderson model: the Atomic Approximation. *ArXiv e-prints*, March 2009.

- [136] T. Lobo, M. S. Figueira, and M. S. Ferreira. Electronic transport through a single-wall carbon nanotube with a magnetic impurity. *Brazilian Journal of Physics*, 36:401 – 404, 06 2006.
- [137] E Ramos, R Franco, J Silva-Valencia, M E Foglio, and M S Figueira. X-boson cumulant approach to the topological Kondo insulators. *Journal of Physics: Conference Series*, 568(5):052007, 2014.
- [138] T Lobo, M S Figueira, and M E Foglio. Kondo effect in a quantum dot—the atomic approach. *Nanotechnology*, 17(24):6016–6026, nov 2006.
- [139] M.S. Figueira V.L. Fernandez and M.E. Foglio. *Revista Mexicana de Física S*, 58(2):213, 2008.
- [140] E. Ramos. Propiedades de Termoeléctricas y de Transporte en Nanoestructuras: Aproximación Atómica con Repulsión Coulombiana finita (U-Finito) Para el Modelo de la Impureza de Anderson. Master’s thesis, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá-Colombia, 2014.
- [141] E. Ramos, J. Silva-Valencia, R. Franco, and M.S. Figueira. The thermoelectric figure of merit for the single electron transistor. *International Journal of Thermal Sciences*, 86:387 – 393, 2014.
- [142] M. Yoshida and L.N. Oliveira. Thermoelectric effects in quantum dots. *Physica B: Condensed Matter*, 404(19):3312 – 3315, 2009.
- [143] E. Müller-Hartmann. The Hubbard model at high dimensions: some exact results and weak coupling theory. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 76(2):211–217, Jun 1989.
- [144] P B Wiegmann and A M Tsvetick. Exact solution of the Anderson model: I. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 16(12):2281, 1983.
- [145] E. Ramos, J. Silva-Valencia, R. Franco, E.C. Siqueira, and M.S. Figueira. Spin-current Seebeck effect in an interacting quantum dot: Atomic approximation for the Anderson impurity model. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, 74:334–339, 2015.
- [146] Edwin Ramos, Roberto Franco, Jereson Silva-Valencia, and Marcos Sergio Figueira. Thermoelectric transport properties through a single-walled zig-zag carbon nanotube side coupled to a correlated quantum dot: Atomic approach for the finite u-impurity Anderson model. *Physica B: Condensed Matter*, 455:99 – 102, 2014.
- [147] David C. Langreth. Friedel sum rule for Anderson’s model of localized impurity states. *Phys. Rev.*, 150:516–518, Oct 1966.

- [148] T. A. Costi and V. Zlatić. Thermoelectric transport through strongly correlated quantum dots. *Phys. Rev. B*, 81:235127, Jun 2010.
- [149] Claas Grenzebach, Frithjof B. Anders, Gerd Czycholl, and Thomas Pruschke. Transport properties of heavy-Fermion systems. *Phys. Rev. B*, 74:195119, Nov 2006.
- [150] Claas Grenzebach, Frithjof B. Anders, Gerd Czycholl, and Thomas Pruschke. Influence of disorder on the transport properties of heavy-Fermion systems. *Phys. Rev. B*, 77:115125, Mar 2008.
- [151] A. Lorek, N. Grewe, and F.B. Anders. Magnetotransport in heavy Fermion compounds. *Solid State Communications*, 78(2):167–172, 1991.
- [152] F.B. Anders and D.L. Cox. Self-consistent treatment of crystal-electric-field-levels in the Anderson lattice. *Physica B: Condensed Matter*, 230-232:441–444, 1997.
- [153] Anil Khurana. Electrical conductivity in the infinite-dimensional Hubbard model. *Phys. Rev. Lett.*, 64:1990–1990, Apr 1990.
- [154] E. Müller-Hartmann. Correlated Fermions on a lattice in high dimensions. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 74(4):507–512, Dec 1989.
- [155] R. Franz and G. Wiedemann. Ueber die Wärme-Leitungsfähigkeit der Metalle. *Annalen der Physik*, 165(8):497–531, 1853.
- [156] N. Wakeham, A.F. Bangura, X. Xu, J.-F. Mercure, M. Greenblatt, and N.E. Hussey. Gross violation of the Wiedemann-Franz law in a quasi-one-dimensional conductor. *Nature Communications*, 2(1), 2011.
- [157] C. L. Kane and Matthew P. A. Fisher. Thermal transport in a luttinger liquid. *Phys. Rev. Lett.*, 76:3192–3195, Apr 1996.
- [158] Arti Garg, David Rasch, Efrat Shimshoni, and Achim Rosch. Large violation of the Wiedemann-Franz law in luttinger liquids. *Phys. Rev. Lett.*, 103:096402, Aug 2009.
- [159] J. Beille, M. B. Maple, J. Wittig, Z. Fisk, and L. E. DeLong. Suppression of the energy gap in SmB_6 under pressure. *Phys. Rev. B*, 28:7397–7400, Dec 1983.
- [160] S. Gabáni, E. Bauer, S. Berger, K. Flachbart, Y. Paderno, C. Paul, V. Pavlík, and N. Shitsevalova. Pressure-induced Fermi-liquid behavior in the Kondo insulator SmB_6 : Possible transition through a quantum critical point. *Phys. Rev. B*, 67:172406, May 2003.

-
- [161] Kohei Nishiyama, Takeshi Mito, Gabriel Pristás, Yukiko Hara, Takehide Koyama, Koichi Ueda, Takao Kohara, Yuichi Akahama, Slavomír Gabáni, Marián Reiffers, Karol Flachbart, Hideto Fukazawa, Yoh Kohori, Nao Takeshita, and Natalia Shitsevalova. Pressure-induced localization of 4f electrons in the intermediate valence compound SmB_6 . *Journal of the Physical Society of Japan*, 82(12):123707, 2013.
- [162] Kai-Wei Chang and Peng-Jen Chen. Anomalous Z_2 antiferromagnetic topological phase in pressurized SmB_6 . *Phys. Rev. B*, 97:195145, May 2018.
- [163] J. H. Pixley, Rong Yu, Silke Paschen, and Qimiao Si. Global phase diagram and momentum distribution of single-particle excitations in Kondo insulators. *Phys. Rev. B*, 98:085110, Aug 2018.