



Universidad de Granada

TESIS DOCTORAL

**Estudio de transiciones de fase topológicas
en materiales de Dirac bidimensionales**

por

Juan Carlos Bolívar Fernández

Programa de Doctorado en Física y Matemáticas (FisyMat)

Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear
Instituto Universitario Carlos I de Física Teórica y Computacional

29 de abril de 2019

Editor: Universidad de Granada. Tesis Doctorales
Autor: Juan Carlos Bolívar Fernández
ISBN: 978-84-1306-234-1
URI: <http://hdl.handle.net/10481/56213>

Tesis Doctoral dirigida por:

Dra. Elvira Romera Gutiérrez

Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear (Universidad de Granada)

Dr. Nicolás A. Cordero Tejedor

Departamento de Física (Universidad de Burgos)

Título de Doctor con Mención Internacional

Con el fin de obtener el Título de Doctor con Mención Internacional se han cumplido, en lo que respecta a esta Tesis Doctoral y a su Defensa se refiere, los siguientes requisitos:

1. La tesis está redactada en español con una introducción en inglés.
2. Uno de los miembros del tribunal proviene de una universidad no española.
3. Una parte de la defensa se ha realizado en inglés.
4. Una parte de esta Tesis Doctoral se ha realizado en una institución extranjera: Facultad de Ciencias de la Universidad de Debrecen (Debrecen, Hungría).

A mi familia

Agradecimientos

Después de varios años de esfuerzo y sacrificio llega el momento de cerrar una de las etapas de mi vida que siempre recordaré de forma muy positiva, en la que he aprendido, disfrutado y sufrido. A lo largo de este camino he conocido gente que ha contribuido a que todo este trabajo saliese adelante y prosperase, es por ello que debo agradecerse en estas líneas.

En primer lugar, quiero agradecer a mi directora de tesis, Elvira Romera, todo el esfuerzo y dedicación que ha invertido en que este trabajo haya sido posible. Quiero agradecerle sus ánimos en los momentos en los que flaqueaban, sus consejos y su apoyo en los momentos oportunos y, sobre todo, el haber depositado su confianza en mí. Ha sido un honor y un placer trabajar bajo su tutela y poder aprender un sinfín de cosas. Solo espero continuar trabajando con ella en el futuro y poder seguir aprendiendo tanto como hasta ahora.

En segundo lugar, quiero agradecer tanto a mi codirector de tesis, Nicolás Cordero, como a Ágnes Nagy, tutora de mi estancia en Debrecen, su colaboración en este trabajo. Su ayuda ha sido una pieza fundamental en el desarrollo de esta tesis y mis estancias en Burgos y Debrecen me han resultado de gran utilidad para mi desarrollo, tanto profesional como personal.

También quiero agradecer a todos los profesores que he tenido a lo largo de mi etapa como estudiante el haber contribuido, en mayor o menor medida, a mi curiosidad científica y motivación. En especial, quiero mostrar mi gratitud a uno de mis profesores del instituto, José Escudero, seguramente sin su ejemplo nunca hubiese estudiado esta rama de la ciencia. Tampoco quiero olvidarme de todos los compañeros que he tenido a lo largo de este tiempo, algunos han pasado y se han ido, otros sé que los tendré para siempre.

Sobre todo aquí, quiero dar las gracias a toda mi familia, sin su apoyo y esfuerzo nunca habría tenido todas las oportunidades de las que he disfrutado. Gracias a vosotros tengo la oportunidad de estar donde estoy ahora. En especial, quiero darle las gracias a mi madre, la persona que siempre ha estado, está y sé que estará a mi lado, muchas gracias por todo mamá.

Por último, no puedo olvidarme de una de las personas más importantes en mi vida. Ella sabe mejor que nadie todo por lo que he pasado hasta llegar a escribir la última palabra que aparece en esta tesis, desde que la conozco siempre me ha apoyado y ayudado en todo y, simplemente, deseo que siempre siga así. Estefanía, muchas gracias.

Índice general

Resumen	XVII
Summary	XXI
Publicaciones	XXV
1. Materiales bidimensionales y aislantes topológicos	1
1.1. Materiales 2D	1
1.1.1. Grafeno	2
1.1.2. Fosforeno	4
1.1.3. Calcogenuros	4
1.1.4. Materiales de Dirac 2D	5
1.2. Siliceno	6
1.3. Aislantes topológicos	9
2. Modelo de Hamiltoniano Efectivo	15
2.1. Teoría del Funcional de la Densidad	15
2.1.1. Primer Teorema de Hohenberg-Kohn	15
2.1.2. Teorema variacional de Hohenberg-Kohn	17
2.1.3. Ecuaciones de Kohn-Sham	17
2.2. El método <i>Tight-Binding</i>	19
2.2.1. Hamiltoniano <i>Tight Binding</i>	20
2.2.2. Simetría traslacional y normalización	21
2.2.3. Bandas de energía	22
2.2.4. Hamiltoniano TB en siliceno	24
2.3. Hamiltoniano efectivo	24
3. Caracterización de transiciones de fase topológicas mediante corrientes electrónicas y Fidelidad	33
3.1. Corrientes	33

3.2. Fidelidad	46
4. Caracterización de transiciones de fase topológicas mediante medidas de información	67
4.1. Medidas de complejidad	67
4.2. Información de Fisher	77
4.3. Medidas entrópicas de Rényi-Fisher	89
5. Caracterización de transiciones de fase topológicas en presencia de un campo láser mediante medidas de información	103
Conclusiones generales	119
General conclusions	123

Resumen

El avance tecnológico y la necesidad de crear dispositivos cada vez más pequeños han hecho necesario estudiar materiales con unas dimensiones cada vez más reducidas. El problema que nos encontramos al reducir el tamaño de un material para su aplicación en cualquier aparato electrónico es que su comportamiento deja de ser clásico y comienzan a aparecer efectos cuánticos que deben ser tenidos en cuenta. Actualmente, se está estudiando una amplia variedad de materiales bidimensionales (como el grafeno, el fosforeno o el siliceno) con el objetivo de proseguir la miniaturización de los dispositivos. Estos materiales ofrecen un gran abanico de posibilidades debido a sus características especiales.

El grafeno es un material completamente bidimensional formado exclusivamente por átomos de carbono dispuestos en forma de panal de abeja. Su existencia fue postulada, por primera vez, en los años 30 y su estructura de bandas fue calculada en 1949 [1], aunque no fue hasta 2004 cuando se consiguió obtener la primera capa aislada de grafeno por medio del conocido método de la “cinta adhesiva” [2]. A partir de esta fecha, los estudios sobre grafeno se han intensificado de forma más que notable, ya que el grafeno ha sido considerado por muchos como “el material del futuro”. Esta consideración se debe a que el grafeno posee características sorprendentes (entre otras, su resistencia es 100 veces superior al acero, es flexible y elástico y posee una conductividad muy alta) lo que le ha hecho ser tenido en cuenta en multitud de campos como en electrónica, en medicina o en la industria textil (siendo la electrónica, concretamente el desarrollo de dispositivos de efecto campo mejores que los actuales, el área de mayor interés). Sin embargo, el grafeno presenta un inconveniente que se conoce como “problema del gap” debido a que sus bandas de valencia y de conducción se tocan lo que hace que su ancho de banda sea nulo. Para solventar el mencionado problema del gap, ha sido necesario estudiar otros materiales similares pero con base atómica diferente como, por ejemplo, el siliceno, el germaneno o el fosforeno (materiales bidimensionales similares al grafeno pero con base de silicio, germanio y fósforo, respectivamente). Estos materiales presentan muchas de las características que tiene el grafeno pero con la ventaja de contar con un gap de energía no nulo. Además, a estos materiales se les conoce como “familia del grafeno”.

El siliceno, el gran protagonista de esta tesis, fue propuesto de forma teórica en 1994 y obtenido de forma experimental en 2010. Es un material isoestructurado con el grafeno (esto es, tiene una

red cristalina hexagonal formada por átomos de silicio) pero se diferencia (del grafeno) en que posee una estructura ondulada que le otorga un acoplamiento espín-órbita significativo y por lo tanto un ancho de banda no nulo. El siliceno, junto con el germaneno y el indio, se incluye dentro de un tipo de materiales denominados “materiales de Dirac bidimensionales” debido a que pueden ser bien descritos a través de la ecuación de Dirac.

Por otra parte, el siliceno forma parte de un grupo de materiales especiales con unas características únicas. Estos materiales reciben el nombre de aislantes topológicos y se caracterizan por tener un comportamiento semimetálico, es decir, no presentan un comportamiento ni totalmente metálico ni totalmente aislante. Los aislantes topológicos solo presentan estados conductivos en la superficie (si son tridimensionales) o en los bordes (si son bidimensionales) y pueden seguir conduciendo incluso en presencia de grandes barreras de energía debido a la protección de simetría que poseen. En particular, el siliceno (al igual que los demás materiales de Dirac 2D) sufre una transición de fase de un aislante de banda convencional a un aislante topológico, lo que se conoce como transición de fase topológica (o TPT por sus siglas en inglés), bajo ciertas circunstancias. Esto es debido a que mediante la aplicación de campos electromagnéticos externos o campos láser, se puede modificar la configuración electrónica y modificar el valor de la masa de Dirac (ancho de banda del material).

El objetivo de esta tesis es conseguir caracterizar las transiciones de fase topológicas que sufren estos materiales. Para ello, a lo largo de este trabajo, se han utilizado diferentes magnitudes físicas que nos han servido como herramientas válidas para caracterizar y localizar dichas transiciones de fase en un sistema formado por una monocapa de siliceno bajo la influencia de campos electromagnéticos externos y campos de luz láser circularmente polarizada. Los resultados que en este trabajo se recogen pueden ser extendidos al resto de materiales de Dirac 2D de forma sencilla.

La utilidad de caracterizar estas transiciones de fase topológicas viene dada por la necesidad de crear nuevos transistores de efecto campo que puedan implantarse en los aparatos electrónicos que manejamos en nuestro día a día (teléfonos y televisores inteligentes, ordenadores, sistemas de audio...). Estos nuevos dispositivos, además de ser más pequeños que los actuales, podrían permitir consumos de energía menores y rendimientos más elevados.

La estructura de esta tesis, la cual está presentada como recopilación de artículos, consta de un primer capítulo introductorio a los materiales bidimensionales, un segundo capítulo en el que se muestran algunas de las herramientas útiles para describir y estudiar nuestro sistema. Los resultados obtenidos se muestran en los capítulos 3, 4 y 5 y, por último, las conclusiones generales obtenidas en este trabajo se muestran en el capítulo final. A continuación, vamos a ver cada parte con algo más de detalle.

En el primer capítulo se presentan algunos de los materiales bidimensionales de mayor relevancia en la actualidad. Entre estos materiales se encuentran el grafeno (precursor del resto), el fosforeno y el siliceno. En este capítulo también se dan a conocer los aislantes topológicos y las

fases en los que se pueden encontrar.

En el segundo, se muestran las herramientas matemáticas que se utilizan para el estudio de las TPTs. Estas herramientas son: la teoría del funcional de la densidad (DFT), el modelo de las ligaduras fuertes (o *tight-binding*) y el modelo de Hamiltoniano efectivo. Este último modelo se basa en el de *tight-binding* para obtener un Hamiltoniano efectivo que nos permite calcular las autoenergías y autofunciones de nuestro sistema y que ofrece resultados útiles.

En el tercer capítulo hemos utilizado la evolución temporal de paquetes de onda para caracterizar las transiciones de fase en siliceno. En este sentido, hemos estudiado el comportamiento de la evolución temporal de la corriente electrónica (periodicidades y amplitudes) así como el de la Fidelidad (o eco de Loschmidt) dentro de este material. Ambas magnitudes han resultado ser buenas herramientas para la identificación de las TPTs.

En el capítulo cuarto se han usado medidas de teoría de la información para conseguir caracterizar las TPTs. Algunas de estas medidas son: información de Fisher, complejidad, entropía de Rényi-Fisher o algunas relaciones de incertidumbre. Con estos resultados hemos sido capaces de definir una serie de nuevos números cuánticos (similares al número de Chern) que nos permiten identificar la fase aislante (normal o topológica) en la que se encuentra nuestro sistema.

En el capítulo número cinco, se ha empleado un modelo de Hamiltoniano efectivo en el que se incluye la presencia de un haz de luz láser circularmente polarizada. Para estudiar las transiciones de fase topológicas que tienen lugar en este sistema se han utilizado, al igual que en el tema anterior, medidas de información. Algunas de estas medidas han sido: la entropía de Rényi, los coeficientes de participación inversa y las relaciones de incertidumbre de Rényi. En este caso, también ha sido posible definir números cuánticos capaces de identificar la fase de aislante topológico en la que se encuentra nuestro sistema.

Los resultados de esta tesis, los cuales se muestran en los capítulos tercero, cuarto y quinto, han conducido a la creación de seis trabajos científicos publicados (en las revistas: *Physics Letter A*, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, *International Journal of Quantum Chemistry*, *Europhysics Letters* y *Journal of Mathematical Chemistry*), que pueden consultarse en la sección de “publicaciones”.

Summary

The development of electronic devices has allowed to reduce the size of them, so it has been necessary to study new smaller materials. But, when we reduce the size of the devices, new quantum phenomena appear. Therefore, we must study new materials that have a good behavior and that can be useful for this purpose. Currently, researchers around the world are working with new 2D materials (such as graphene, phosphorene or silicene) that, a priori, offer many possibilities for the creation of new devices.

Graphene is a two-dimensional honeycomb structure formed by carbon atoms. Graphene was studied theoretically in the 1930s and its band structure was calculated in 1949 [1]. Although, it was not until 2004 that researchers were able to obtain an isolated sheet of this material using the “scotch tape” method [2]. The number of works about graphene has increases in the last years owe to many people consider graphene as “the future material” because its amazing features. Among the graphene properties we can find: it has a big strenght (about one hundred times upper than steel), it is flexible and elastic and it has an elevate electrical contuctance. These features make possible to apply graphene in a big range of fields such as electronic, medicine or textile industry (being electronic the field more interesting for us). Nevertheless, graphene shows a bite-big inconvenient because its band gap is zero (known as "gap problem"), that is, its conductance band and valence band are in touch, that means that graphene is not compatible with the current technology. So, we need to study others materials capables to solve this problem. Some of these materials are phosphorene, germanene or silicene (bidimensional materials like graphene but formed by phosphorous, germanium and silicon atoms respectively). These materials have similar properties to graphene but with the advantage of they have a non zero band gap (moreover, in many cases, we can control this gap). These materials are known as "graphene family".

Silicene was proposed theoretically in 1194 and it was obtained experimentally in 2010. It is a isostructural material with graphene (so, it has a honeycomb structure formed by silicon atoms) but silicene has a buckled structure and a significative spin-orbit coupling, this features make that silicene has a non zero band gap.

On the other hand, silicene belongs to a group of materials with unique features. These materials are called “topological insulators” and they have a semi-metallic behavior, that is, they are not neither metallic neither insulator. Topological insulators only have conducting states on their surfa-

ce (in the tridimensional case) or in their bordier (in the bidimensional case) and they can conduct in the presence of big energy barriers because their symmetry protection. Particularly, silicene (and the other 2D Dirac materials) suffers a topological phase transition (TPT) from a regular band insulator (BI) to a topological insulator (TI) under specific conditions. TPT is due to we can modify the electronic band structure (that is, the Dirac mass or the band gap) by mean electromagnetic and lasers fields.

The goal of this doctoral thesis is to characterize the TPT in these materials. For such purpose, we have analyzed several physics magnitudes that have resulted to be valid tools for characterize and localize the TPT in a system formed by a single sheet of silicene under the effect of several fields (electric, magnetic and circularly polarized laser). The results reached here can be extended (in a simple way) to the other 2D Dirac materials.

The possibility of applying 2D materials in new electronic devices (such as field effect transistors, for example) makes necessary to study and characterize them. These new systems could be applied in electronic devices that we use in our daily life (smartphones, smarttvs, computers...). Moreover, this appliances would be smaller and more powerful than the current devices.

The thesis structure, which is presented as a collection of articles) is as follow: in the first chapter we introduce the 2D Dirac materials, in chapter two are shown the tools that we have utilized for study and describe our system. Chapters three, four and five contain the main results obtained in our work. Ultimately, final conclusions are presented in the last chapter. to continue, we are going to see each part with more detail.

In the first chapter, we show some of the most important 2D materials researchers are working with nowadays. Some of them are: graphene, black phosphorous and, of course, silicene. In addition, we introduce the notion of topological insulator and its phase transitions.

Chapter two shows the methods that we can use to describe the behavior of silicene. These are: density functional theory, tight binding model and effective hamiltonian model. Among these methods, we are going to use the effective hamiltonian model, that is based in tight binding and have proven to be useful for discribing our system. In this chapter we explain the main calculations that we have used.

In the third chapter we have utilized the time evolution of wave packets to characterize the topological phase transitions in silicene. In this way, we have studied the time evolution of the electronic currents (periodicities and amplitudes) that have turned out to be a good tool for this work. On the other hand, we have analyzed the behavior of the fidelity (or quantum Loschmidt echo) in silicene too. Fidelity is a good marker of topological phase transitions and the results obtained were satisfactory.

Chapter four contains information theory measures that have helped to characterize the topological phase transitions. Some of them are: Fisher information, complexity, Rényi-Fisher entropy or uncertainty relations. With this results, we have been able to define new quantum topological

numbers (like Chern number) to classify the topological/band insulator phase.

In chapter five we have used the effective Hamiltonian model to study a sheet of silicene under electromagnetic fields but, in this case, we have considered the influence of a circularly polarized laser too. The utilization of a laser opens new states in silicene and gives rise to new quantum states. In our studies, we have utilized information theory tools that have allowed us to characterize the topological phase transitions in this system. In the same way that in the previous chapter, we have been able to define new topological numbers to classify the system.

The results obtained here, whose are shown in the third, fourth and fifth chapters, have let us in the creation of six scientific reports published (in the interviews *Physics Letter A*, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, *International Journal of Quantum Chemistry*, *Europhysics Letters* and *Journal of Mathematical Chemistry*). They can be consulted at the “publications” section.

Publicaciones

Trabajos publicados por el doctorando durante el desarrollo de esta tesis

1. E. Romera, **J. C. Bolívar**, J. B. Roldán and F. de los Santos, Revivals of electron currents and topological-band insulator transitions in 2D gapped Dirac materials, *Europhysics Letters*, **115**, 20008 (2016). (Capítulo 3)
DOI: <https://doi.org/10.1209/0295-5075/115/20008>
2. **J. C. Bolívar** and E. Romera, Rényi entropies and topological quantum numbers in 2D gapped Dirac materials, *Physics Letter A*, **381**, 1763-1756 (2017). (Capítulo 4)
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2017.03.037>
3. **J. C. Bolívar**, Á. Nagy and E. Romera, Rényi–Fisher entropy product as a marker of topological phase transitions, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, **498**, 66-73 (2018). (Capítulo 4)
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physa.2018.01.024>
4. **J. C. Bolívar**, N. A. Cordero, Á. Nagy, E. Romera, Fidelity as a marker of topological phase transitions in 2D Dirac materials, *International Journal of Quantum Chemistry*, **118**, e25674 (2018). (Capítulo 3)
DOI: <https://doi.org/10.1002/qua.25674>
5. E. Romera, M. Calixto and **J. C. Bolívar**, Information measures and topological-band insulator transitions in 2D-Dirac materials under external circularly polarized lasers, and static electric and magnetic fields, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, **511**, 174-181 (2018). (Capítulo 5)
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physa.2018.07.048>
6. **J. C. Bolívar**, Á. Nagy and E. Romera, Phase-space Fisher information of 2D gapped Dirac materials, *Journal of Mathematical Chemistry*, 1-12 (2019). (Capítulo 4)
DOI: <https://doi.org/10.1007/s10910-019-01015-2>

Capítulo 1

Materiales bidimensionales y aislantes topológicos

En este primer capítulo estudiaremos algunos de los materiales bidimensionales con los que se está trabajando en la actualidad. Entre estos materiales se encuentran el grafeno, material de gran interés y precursor de los demás materiales 2D existentes, y el siliceno, perteneciente a la familia de materiales de Dirac bidimensionales (objeto de estudio de esta tesis) y que ha adquirido una relevancia importante en los últimos años. El siliceno, además, tiene un comportamiento especial bajo unas condiciones específicas, por lo que es considerado un aislante topológico (un nuevo tipo de material). Dedicaremos la última sección de este capítulo a presentar los aislantes topológicos y las transiciones de fase que en ellos tienen lugar.

1.1. Materiales 2D

Desde el descubrimiento de forma experimental del grafeno se ha iniciado una nueva rama de investigación dedicada al estudio de materiales 2D y sus propiedades. Debido a su baja dimensionalidad, estos materiales tienen un comportamiento diferente al que poseen sus homólogos tridimensionales, esto es, las propiedades de los sistemas cambian cuando pasamos de dos a tres dimensiones. Estos cambios son producidos por el aumento de las fluctuaciones cuánticas y térmicas que se generan al restringir el sistema a dos dimensiones [3]. Las diferentes estructuras que poseen los distintos materiales 2D hacen que estos, a su vez, tengan propiedades y comportamientos diferentes, lo que ofrece la ventaja de poder utilizar un material u otro en función de las necesidades y las metas que se persigan. Además, estas propiedades pueden ser modificadas mediante el empleo de diversas técnicas (como la adición de capas de material 2D o la aplicación de campos y potenciales externos) lo que hace a estos materiales aún más interesantes.

A continuación, vamos a presentar algunos de los materiales 2D con los que se está trabajando actualmente. Para ello, comenzaremos presentando al grafeno como precursor de estos.

1.1.1. Grafeno

El carbono es uno de los materiales más populares, versátiles e importantes del mundo en el que vivimos. Por un lado, este elemento químico es la base de la vida tal y como la conocemos, por otro, algunos derivados del carbono (como los hidrocarburos) constituyen los cimientos de la economía de casi todo el planeta y, además, en los últimos años algunas estructuras alótropas del carbono han focalizado numerosos estudios y se han catalogado como el futuro de los dispositivos que podremos utilizar en nuestra vida cotidiana.

El carbono es un elemento químico que aparece en el grupo 14 de la tabla periódica, su número atómico es 6 y consta de tres isótopos, carbono 12 y 13 (estables) y carbono 14 (radioactivo, con vida media de 5730 años). El carbono representa el 0.02 % en peso de la corteza terrestre (ocupa el puesto número quince en la lista de elementos más abundantes de esta) [4] y su estructura electrónica es $1s^2 2s^2 2p^2$. El core del carbono está formado por el núcleo atómico y los dos electrones que se encuentran en el orbital $1s^2$. Por otro lado, los cuatro electrones sobrantes son electrones de valencia y se reparten en los orbitales $2s$, $2p_x$, $2p_y$ y $2p_z$. De esta forma, podremos tener hibridación entre el orbital $2s$ y uno, dos o tres de los orbitales $2p$, denominándose (según la cantidad de orbitales involucrados en dicha combinación) hibridación sp^n (con $n = 1, 2, 3$). Los enlaces formados por los orbitales sp^n se denominan enlaces tipo σ mientras que los enlaces formados por los orbitales p se denominan tipo π , siendo los enlaces σ mucho más fuertes que los π . El tipo de enlace que utilicen los átomos de carbono para unirse a otros átomos y formar otros compuestos determinarán las características de estos. De igual forma, el tipo de enlaces que se presenten en la unión exclusiva de átomos de carbono entre sí para formar nuevos compuestos (alótropos del carbono) determinarán las propiedades que estos manifiesten. Se conocen, hasta la fecha, 5 formas alotrópicas del carbono: grafito, diamante, fullerenos, carbino y grafeno. De todos los alótropos del carbono, para nuestro estudio, el grafeno es el más interesante.

El grafeno (ver fig. 1.1) es un semi-metal constituido exclusivamente por átomos de carbono, los cuales se unen mediante enlaces covalentes tipo σ (que se forman por la superposición de los híbridos sp^2), formando un patrón regular con forma hexagonal (similar a un panal de abeja) y de un solo átomo de espesor. Debido a las características de sus enlaces, el grafeno es un material totalmente plano (es decir, bidimensional) cuyas bandas de valencia y conducción están en contacto, lo que hace que tenga un gap de energía nulo. El grafeno fue planteado como material teórico en 1947 por Wallace, pero no fue hasta 2004 cuando se consiguió aislar una lámina de grafeno por Geim y Novoselov [5], hecho que les llevó a obtener el premio Nobel en 2010.

Este material posee unas características extraordinarias, entre ellas podemos encontrar que su densidad es aproximadamente igual a la de la fibra de carbono, con la ventaja de ser unas 100 veces más resistente que el acero y 5 veces más ligero que el aluminio. Además de esto, el grafeno es muy flexible y elástico, es casi transparente, posee elevadas conductividades eléctricas y térmicas, reacciona químicamente con otras sustancias para producir diferentes compuestos (lo

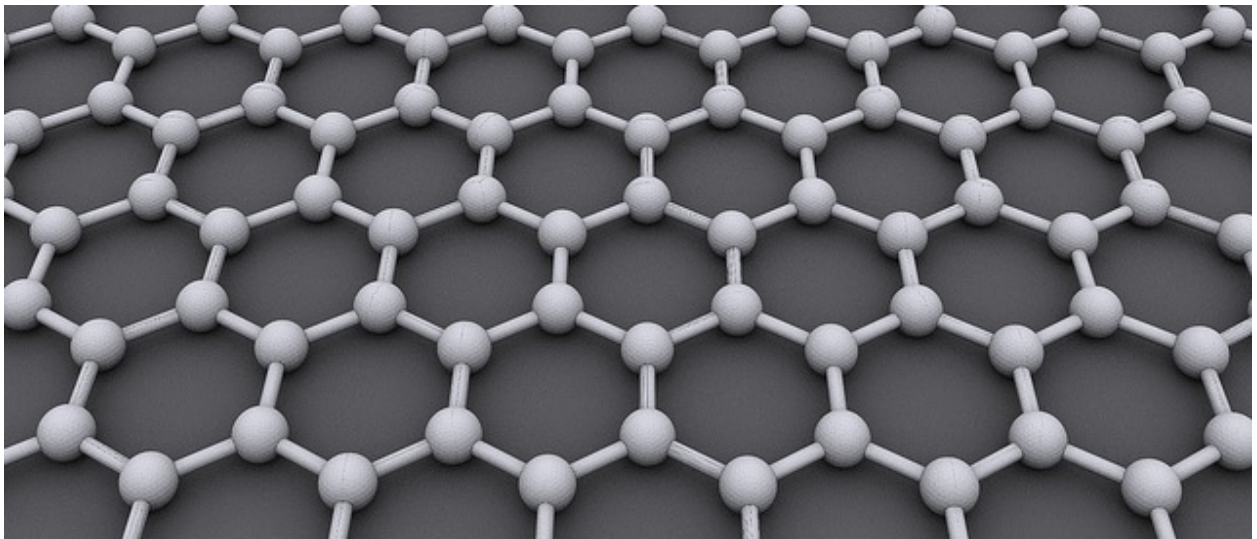


Figura 1.1: Representación de una monocapa de átomos de carbono (grafeno) [6].

que eleva su potencial de desarrollo), el efecto Joule es bajo (se calienta menos que otros materiales al conducir electrones), genera electricidad por radiación, se aplica en supercondensadores debido a su alta relación superficie/volumen y tiene la capacidad de autorrepararse. Estas extraordinarias propiedades hacen que se esté investigando en la inclusión del grafeno en una gran variedad de campos como, por ejemplo, en electrónica (desarrollo de dispositivos como transistores de efecto campo (FET), supercondensadores o cables de alta velocidad), en medicina (tratamientos contra el cancer) o en tratamiento de agua (desalinización de agua y filtros).

Actualmente, existen multitud de técnicas para producir grafeno. A continuación veremos algunas de ellas:

- Exfoliación con cinta adhesiva o método "*Scotch Tape*": este fue el primer procedimiento por el que se consiguió aislar grafeno monocapa. Este método consiste en pegar y despegar cinta adhesiva sobre una capa de grafito, de esta forma se puede obtener, en alguna de las cintas, una sola lámina de grafeno [2]. Aunque esta técnica es aparentemente sencilla, la producción en masa no es posible por este medio. A ello se le suma que el aislamiento de las monocapas obtenidas es muy complicado.
- Exfoliación con disolventes: existen técnicas avanzadas por las que, mediante el uso de líquidos disolventes, se puede decapar el grafito para obtener grafeno libre de impurezas. Estos métodos permiten obtener grafeno a gran escala, lo que podría facilitar su uso comercial [7].
- Grafeno epitaxial: mediante esta técnica se puede hacer crecer grafeno en diferentes soportes. El grafeno cultivado de esta forma puede poseer algunas propiedades diferentes dependiendo del sustrato que se utilice [8]. Algunos de los materiales sobre los que se puede hacer crecer el grafeno son, por ejemplo, silicio, estaño, iridio o platino entre otros.

- Mediante descarga de arco eléctrico y generación de plasma: utilizando grandes descargas eléctricas sobre grafito también se puede generar grafeno. Esta técnica también se utiliza en la creación de nanotubos de carbono.
- A partir de azúcar: investigadores de la Universidad Rice han logrado obtener grafeno a partir de azúcar calentado a 800 °C [9]. Según su estudio, el grafeno obtenido por este medio es de alta calidad y pueden controlarse varios parámetros como el espesor o la cantidad de capas.

1.1.2. Fosforeno

El fosforeno (también conocido como fósforo negro) es otro de los materiales 2D con los que se está trabajando. El fosforeno es una red hexagonal formada por átomos de fósforo y con una estructura “arrugada” a lo largo de la dirección “armchair”, lo que hace que aparezcan dos tipos de ligaduras, el primer tipo consiste en ligaduras paralelas al plano bidimensional (con una longitud de enlace $d_1 = 2,224 \text{ \AA}$) y el segundo tipo consiste en ligaduras fuera del plano que forman un ángulo de 71.7° con este (con una longitud de enlace $d_2 = 2,244 \text{ \AA}$) [10, 11].

Una de las características más atractivas del fosforeno es que posee un ancho de banda no nulo que puede ser modificado mediante la adición de capas de material, pudiendo tener un gap del orden de 0,3 eV (en el caso de varias capas) hasta del orden de 1,5 eV (cuando solo tenemos una capa de fósforo negro). Además, el ancho de banda también sufre variaciones en presencia de campos y potenciales externos. Estas propiedades hacen que el fósforo negro tenga una aplicación potencial en dispositivos electrónicos [3, 12].

1.1.3. Calcogenuros

Los calcogenuros bidimensionales están formados por calcogenuros compuestos por un elemento metálico (metales de transición, como molibdeno o wolframio, metaloides, como germanio, o metales del grupo p, como el estaño) y un elemento del grupo 16 (azufre, selenio o telurio). Dentro de este tipo de materiales existen tres categorías diferentes dependiendo de la formulación del compuesto que conforme la estructura 2D, estas son: Monocalcogenuros (MX), dicalcogenuros (MX_2) y tricalcogenuros (MX_3). Cada uno de estos tipos posee estructura y propiedades diferentes como veremos ahora:

- Monocalcogenuros. Los monocalcogenuros tienen una estructura cristalina formada por dos átomos (donde M puede ser germanio o estaño y X azufre o selenio) con una estructura ortorrómbica arrugada, similar al fósforo negro. Entre sus características cuenta con un comportamiento semiconductor con un gap indirecto (entre 1,2 y 2,7 eV, según el material), no posee simetría de inversión y presenta propiedades piezoeléctricas [3, 13].

- Dicalcogenuros. Dentro de los calcogenuros bidimensionales, los dicalcogenuros son el tipo más estudiado. Se forman con una estructura tipo sándwich en la que los átomos tipo M (molibdeno o wolframio) se unen a 6 del tipo X (azufre, selenio o telurio), tres arriba y tres abajo, formando una red triangular, por tanto, este tipo de material puede verse como la superposición de tres capas bidimensionales (X-M-X). Entre las propiedades de los dicalcogenuros se puede destacar que la naturaleza del gap depende del espesor, esto es, poseen un gap directo ($\sim 1,9$ eV) si solo tenemos una monocapa e indirecto ($\sim 1,3$ eV) en el caso de varias capas apiladas. Otra importante característica es que estos materiales poseen un acoplamiento espín-órbita significativo, entre 140 meV (molibdeno) y 400 meV (wolframio) [3, 14].
- Tricalcogenuros. En este caso, cada átomo M (titanio, circonio o hafnio) se une a ocho átomos tipo X (azufre, selenio o telurio). Poseen un ancho de banda directo, el cual depende débilmente del número de capas que tengamos y de la presencia de campos externos [3].

1.1.4. Materiales de Dirac 2D

Los materiales de Dirac bidimensionales son materiales 2D isoestructurados con el grafeno, con la diferencia de poseer una estructura flexionada (y no plana) que es producida debido a que los átomos se unen mediante orbitales híbridos entre sp^2 y sp^3 (en vez de la sp^2 de los átomos de carbono en el grafeno), esto hace que el acoplamiento espín-órbita no sea despreciable (entre 4.2 y 36 meV). Estos materiales poseen un gap de energía directo que puede ser controlado mediante campos electromagnéticos y que viene dado por la masa de Dirac. Además, en estos materiales aparece una transición de fase de aislante de banda convencional a aislante topológico (un nuevo estado de la materia en el que no se tiene un comportamiento ni puramente aislante ni conductor). Algunos de estos materiales 2D son: germaneno (con base de Ge), estaneno (base de Sn) y siliceno (base de silicio). De entre estos materiales, hemos escogido el siliceno como base de nuestro estudio y, por este motivo, vamos a verlo con mayor profundidad en la siguiente sección.

1.2. Siliceno

Hasta el año 2010 se pensó que el grafeno desbancaría al silicio en la industria electrónica, sin embargo, el descubrimiento del siliceno (material isoestructurado con el grafeno pero con base de silicio) en ese mismo año, significó una revolución en el estudio de los llamados materiales de Dirac bidimensionales. El descubrimiento y la síntesis de este material (siliceno) trajeron el consiguiente descubrimiento de otros materiales 2D con estructura de panal de abeja, como son el germaneno, el estaneno o el fosforeno.

El silicio es un elemento químico metaloide, de número atómico 14 y perteneciente al grupo 14 de la tabla periódica, al igual que el carbono. El silicio es el segundo elemento más abundante en la corteza terrestre, ya que representa el 27,7% en peso. Además, es un buen semiconductor, es por esto que su presencia en el mundo de la electrónica es muy importante.

La estructura electrónica del silicio, $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2$ y $3p^2$, es similar a la del carbono. debido a esto es posible crear una red hexagonal en forma de panal de abeja similar al grafeno (estructura que se conoce con el nombre de siliceno). A diferencia del carbono, que posee hibridación sp^2 , el silicio tiene una hibridación más próxima a sp^3 (debido a su mayor radio iónico) lo que favorece la aparición de una ondulación o flexión en las láminas de siliceno, tal como se muestra en la figura 1.2. Por tanto, podemos decir que el siliceno es un material isoestructurado con el grafeno, con la diferencia fundamental de que su base es de silicio, su estructura es ondulada, y tiene un acoplamiento espín-órbita importante.

También cabe destacar que, mientras que el grafeno aparece en la naturaleza agrupado en múltiples capas (grafito), el siliceno no puede encontrarse en el silicio natural de la misma forma, por tanto, el siliceno es un material artificial y hasta ahora solo puede producirse de la forma que se describirá más adelante. Del mismo modo que el siliceno, se pueden construir redes hexagonales 2D de otros materiales con estructura electrónica parecida a la del carbono y el silicio como, por ejemplo, germaneno (base de germanio) o estaneno (base de estaño). A menudo se hace referencia a este tipo de objetos como "materiales dentro de la familia del grafeno".

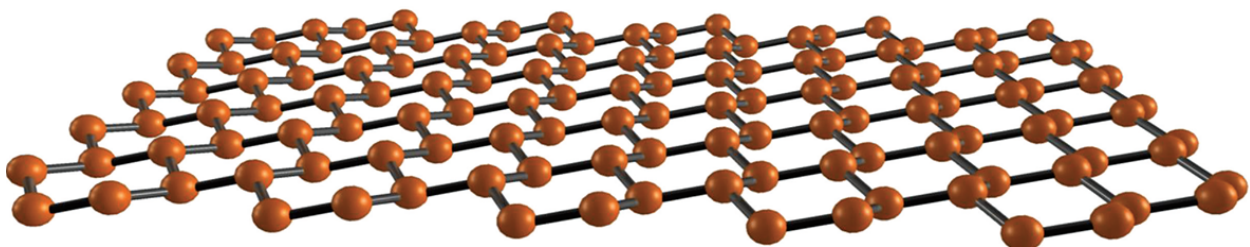


Figura 1.2: Representación de una monocapa de átomos de silicio (siliceno) [15].

Por lo expuesto anteriormente, las capas de siliceno no pueden ser generadas por medio de los métodos que se usan comúnmente para generar grafeno. A pesar de que la estabilidad de este

material en su estado libre ha sido predicha, hoy en día su existencia tan solo ha sido posible sobre plantillas de soporte. Los esfuerzos por alcanzar la síntesis de una red de silicio están enfocados, principalmente, a su explotación potencial en aplicaciones electrónicas mediante el aprovechamiento de su afinidad constitutiva con la tecnología basada en el silicio. Además, un impulso en la exploración del siliceno, como material aplicable en la electrónica, viene de lo que podemos llamar “el problema del gap”. Cabe decir que, mientras que los semiconductores convencionales poseen un ancho de banda prohibida, el grafeno es un material con ancho de banda cero, lo que repercute fuertemente en su aplicación en dispositivos electrónicos, al menos tal y como están diseñados hoy en día. Por tanto, a pesar de que el grafeno tiene propiedades electrónicas excepcionales, no puede ser usado como la tecnología de transistores actual para realizar operaciones lógicas, donde los mecanismos de conmutación necesarios implican la presencia de un gap de energía en la estructura electrónica. El siliceno podría tener la oportunidad de afrontar el problema del gap mediante la apertura de una banda de energía prohibida en su estructura electrónica. Esto podría ser posible debido al aprovechamiento de algunas características particulares de la red del siliceno, como su fuerte acoplamiento espín-órbita o su estructura ondulada. Lo mencionado anteriormente posiciona al siliceno en competición directa con otros materiales bajo investigación para la tecnología del futuro.

Para comprender mejor los últimos avances en el campo del siliceno, haremos un breve resumen de la etapa teórica previa. En primer lugar, en 1994 Takeda y Shiraishi mediante estudios basados en primeros principios argumentaron la existencia de siliceno y germaneno[16], con la diferencia de que estas estructuras no eran planas al igual que el grafeno, sino que presentaban ondulaciones (o flexiones). Esta ondulación es la característica más importante de este estudio debido a que lo hace más estable que una estructura plana. Posteriormente, en 2007, se estudió esta estructura de silicio mediante *tight-binding* para dar cuenta de las propiedades electrónicas de este material [17]. Cahangirov y colaboradores estudiaron las diferentes estructuras posibles que podía tener el siliceno, concluyendo que la estructura de silicio con forma de panal de abeja (como el grafeno) es aquella que posee una estructura poco ondulada y una longitud de enlace de $0,22 \text{ \AA}$. La configuración con baja ondulación es semi-metálica con las bandas π y π^* cruzando el nivel de Fermi en los puntos K y K' , y posee una velocidad de Fermi estimada de $4,2 \times 10^5 \text{ m s}^{-1}$. La flexión presente en el siliceno implica la posibilidad de controlar el ancho de banda mediante la aplicación de un campo eléctrico, lo cual le confiere un gran interés en el campo de la electrónica.

En el cuadro 1.1 podemos ver algunas características (acoplamiento espín-órbita, longitud de enlace y velocidad de Fermi) de los principales materiales bidimensionales, similares al grafeno, con los que se está trabajando hoy en día. Estas características influyen en el comportamiento obtenido en el material y la evolución temporal de las corrientes dentro del mismo.

	Δ_{SO} (meV)	d (Å)	v_{F} (10^5 m/s)
Si	4,2	0,22	4,2
Ge	11,8	0,34	8,8
Sn	36,0	0,42	9,7

Cuadro 1.1: Parámetros: Δ_{SO} (Acoplamiento espín-órbita), d (longitud de enlace) [18] y v_{F} (Velocidad de Fermi) [19, 20] para monocapas de Si (siliceno), Ge (germaneno) y Sn (estaneno).

Actualmente, la única forma de producir siliceno es a través de su crecimiento sobre un sustrato de plata (111), aunque también puede funcionar sobre un sustrato de diboruro de circonio [21]. Para ello es necesario de una cámara de alto vacío y calentar a 530 °C durante 30 minutos, controlando el proceso en todo momento. Para poder retirar la lámina de siliceno del sustrato de aluminio es necesario recubrir la muestra in situ con una capa de óxido de aluminio.

El interés de utilizar siliceno se encuentra en que el silicio es muy abundante y fácil de conseguir. Por tanto, una tecnología basada en este material podría ser muy rentable y sencilla de obtener. Además de esto, las magníficas propiedades del siliceno hacen que tenga potencial aplicación en muchos campos. Algunas de estas aplicaciones son:

- Superbaterías eléctricas.

El siliceno es un candidato ideal para el desarrollo de nuevas baterías capaces de almacenar más energía y ser más longevas. Mientras que, actualmente, el silicio es de los mejores materiales para recibir los átomos de litio durante la carga de las baterías, el siliceno parece mejorar esta propiedad, ofreciendo una gran resistencia a los grandes cambios de volumen que se producen en la recogida de los átomos de litio, siendo esta subida de tan solo el 27 % (frente el 400 % del silicio cristalino).

Además, el siliceno permitiría una mejor difusión de los átomos de litio (lo que significa que la barrera energética es menor) que el silicio cristalino. Esto y el menor aumento de volumen en la captación, hacen del siliceno un candidato ideal para usarlo como ánodo en nuevas baterías. La capacidad para un ánodo de siliceno se prevé que sea de unos 715 a 954 mAh/g, más del doble que la del grafito.

- Pantallas táctiles flexibles.

Aprovechando la alta conductividad del siliceno, su flexibilidad y su transparencia, se puede colocar una lámina de siliceno que se sitúe entre un panel de píxeles y el retroiluminado para captar los toques en la pantalla. Por lo que podría facilitar la creación y desarrollo de nuevas pantallas (táctiles y flexibles).

- MOSFET.

Uno de los fines de las estructuras 2D es conseguir crear un MOSFET con una longitud de puerta de 5 nm (o, incluso, inferior). Conseguir esto es muy importante para proseguir con la miniaturización de los dispositivos electrónicos. En este campo se han realizado avances muy significativos y cada vez se está más cerca de conseguirlo. Mediante la utilización de complejas técnicas ya se han conseguido construir los primeros MOSFET de siliceno capaces de operar a temperatura ambiente.

- Compatibilidad con la tecnología actual.

Los experimentos que se han realizado hasta ahora han demostrado que el siliceno posee todas las características que hacen único al grafeno con el añadido de que, en el futuro, será mucho más barato de producir. Además de esto, el siliceno podría tener total compatibilidad con los componentes semiconductores actuales, con lo que su aplicación en electrónica podría ser más sencilla que la de otros materiales.

1.3. Aislantes topológicos

Un aislante topológico es un material que se comporta como un aislante bajo unas condiciones concretas y como un conductor cuando se tienen otras. Este comportamiento anómalo es debido a que los aislantes topológicos presentan un orden topológico especial (no trivial) y que hace que estos materiales se comporten como un aislante en su interior pero que puedan tener estados conductivos en su superficie (en el caso de aislantes topológicos bidimensionales la conducción se tiene únicamente en los bordes). No obstante, aunque la presencia de estados conductivos en la superficie no es una propiedad exclusiva de los aislantes topológicos (ya que los aislantes convencionales también pueden tenerlos) el hecho de poder mantener estos estados incluso en presencia de grandes barreras de energía (como la dispersión producida por impurezas o defectos en su superficie) sí que lo es. Esta magnífica propiedad se debe a que los aislantes topológicos poseen simetría de inversión temporal y conservación del número de partículas. Estos materiales han adquirido una gran popularidad en los últimos tiempos y han sido el foco de numerosos estudios [22, 23, 24]. Una propiedad muy interesante de los aislantes topológicos es que presentan un gap de energía entre las bandas de conducción y de valencia que está invertido hacia la superficie (esto es, la banda de conducción puede tener una energía menor que la banda de valencia) esto es debido a su fuerte interacción espín-órbita, Δ_{SO} . Esta característica única hace que tengan grandes posibilidades en aplicaciones electrónicas.

Mediante la ecuación de Dirac (1.1) [25] se pueden describir las propiedades electrónicas, en la

aproximación de baja energía, de una amplia familia de aislantes topológicos y superconductores:

$$\left(\sigma_0 mc^2 + \sum_{j=1}^3 \sigma_j \hat{p}_j c \right) \Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (1.1)$$

donde m es la masa en reposo del electrón, σ_i son las matrices de Pauli, \hat{p}_j se corresponde con los operadores momento, $\Psi(\mathbf{r}, t)$ es una función de onda (siendo \mathbf{r} y t las coordenadas en espacio y tiempo) y, como es habitual, c y \hbar son la velocidad de la luz y la constante de Planck reducida respectivamente. Los materiales cuyo comportamiento puede ser descrito mediante la ecuación de Dirac son conocidos como materiales de Dirac. Nosotros vamos a centrarnos en los materiales 2D que pueden ser descritos por medio de esta ecuación, por lo tanto, en nuestro caso hablaremos de materiales de Dirac bidimensionales.

Como ya se comentó anteriormente, la diferencia principal entre el grafeno y otros materiales artificiales isoestructurados con este (siliceno, estaneno,...) es que estos últimos poseen un fuerte acoplamiento espín-órbita y muestran un efecto Hall de espín cuántico [26, 27]. Mediante la aplicación de campos, uno eléctrico y otro magnético, perpendiculares a la lámina del material 2D considerado podemos controlar el ancho de banda (en estudios más recientes también se ha conseguido modificar el gap de energía mediante la aplicación de un haz de luz láser circularmente polarizada). De esta forma, el gap de energía del material vendrá dado por la masa de Dirac $\Delta_s^\xi = (\Delta_z - s\xi\Delta_{SO})/2$ (en ausencia de campo láser) y $\Delta_s^\xi = (\Delta_z - s\xi\Delta_{SO} + \xi\lambda)/2$ (en presencia de campo láser), donde $s = \pm 1$ representa el espín, $\xi = \pm 1$ el valle, Δ_z es el potencial eléctrico generado y λ es una constante de acoplamiento entre el material y el láser. Se ha comprobado (en ausencia de un campo láser) que en los puntos donde existe una cancelación entre el potencial creado por el campo eléctrico y el acoplamiento espín-órbita se produce una transición de fase de aislante de banda (BI, $|\Delta_z| > \Delta_{SO}$) a aislante topológico (TI, $|\Delta_z| < \Delta_{SO}$), estos puntos se denominan puntos de carga neutra (CNPs) y verifican $\Delta_z^0 = s\xi\Delta_{SO}$. Esta transición se conoce como transición de fase topológica (TPT). Por tanto, podemos entender una transición de fase topológica como el punto donde se pasa de tener estados conductivos tanto en el interior como en la superficie del material al punto en el que todos los estados conductivos se encuentran en la superficie de este, es decir, que todos los electrones son conducidos por la superficie del material. Cuando se aplica campo láser, el comportamiento es parecido pero debemos cambiar Δ_z por Δ'_z , siendo $\Delta'_z = s\xi\Delta_z + \xi\lambda$.

Clasificación de aislantes topológicos mediante el número de Chern

Los aislantes topológicos pueden ser clasificados según la fase aislante en la que se encuentren, pudiendo detectarse esta por medio de la evolución temporal de los estados de Bloch [28] o mediante el número de Chern [29], definido a través de la curvatura de Berry. Nosotros utilizaremos

esta última técnica para saber la fase aislante en la que se encuentra nuestro sistema. Para ello, pasamos a describirla a continuación.

- Número de Chern

Se puede definir un “potencial aproximado” para cualquier estado aislante $|\Psi(\mathbf{k})\rangle$ en el espacio de momentos [29]:

$$a_i(\mathbf{k}) = -i\langle \Psi(\mathbf{k}) | \frac{\partial}{\partial k_i} | \Psi(\mathbf{k}) \rangle, \quad (1.2)$$

este potencial aproximado recibe el nombre de conexión de Berry. Cuando uno define el “campo magnético” en el espacio de momentos, este recibe el nombre de curvatura de Berry $F(\mathbf{k})$

$$F(\mathbf{k}) = \frac{\partial}{\partial k_x} a_y(\mathbf{k}) - \frac{\partial}{\partial k_y} a_x(\mathbf{k}). \quad (1.3)$$

Con esto, el número de Chern (C) se define como la integral de la curvatura de Berry sobre la primera zona de Brillouin, esto es, el flujo total del campo magnético en dicha zona [29]

$$C = \frac{1}{2\pi} \int F(\mathbf{k}) d^2k. \quad (1.4)$$

Por tanto, la curvatura de Berry está localizada en los puntos K y K' de manera estricta de acuerdo con la definición dada. Esta característica permite que el Hamiltoniano de Dirac sea válido para realizar análisis topológicos en cada uno de los valles, los cuales se caracterizan por los índices de espín $s = \pm 1$ y los índices de valle $\xi = \pm 1$. Por lo tanto, podemos asignar un número de Chern, C_s^ξ , a cada valle.

De este modo cuando el Hamiltoniano viene dado por (13), y la curvatura de Berry adopta la forma

$$F_s^\xi(\mathbf{k}) = -\xi \frac{\Delta_s^\xi}{2((v_F \hbar k)^2 + (\Delta_s^\xi)^2)^{3/2}}, \quad (1.5)$$

que puede ser calculada para cada valle. Con ayuda de esta última expresión, se puede obtener el número de Chern de igual forma que en [29],

$$C_s^\xi = -\frac{\xi}{2} \text{sgn}(\Delta_s^\xi), \quad (1.6)$$

donde Δ_s^ξ es la masa de Dirac.

El número de Chern está cuantizado, $C_s^\xi = \pm \frac{1}{2}$. Lo que hace que sea insensible a una deformación en la estructura de bandas, propiciando la apertura del gap. Por otro lado, el

número de Chern cambia de signo cuando la masa de Dirac cambia de signo. Por tanto una fase aislante está caracterizada por una combinación de cuatro números de Chern C_s^ξ . Por tanto, como una transición de fase topológica tiene lugar cuando la masa de Dirac Δ_s^ξ cambia de signo, el número de Chern es una forma de caracterizar las TFTs.

■ Clasificación de los aislantes topológicos

De forma análoga a como se han definido los cuatro números de Chern independientes, C_s^ξ , se pueden definir los números de Chern total C , de espín C_s , de valle C_ξ y de espín-valle $C_{s\xi}$, de la forma [29]:

$$\begin{aligned} C &= C_\uparrow^K + C_\uparrow^{K'} + C_\downarrow^K + C_\downarrow^{K'}, \\ C_s &= \frac{1}{2}(C_\uparrow^K + C_\uparrow^{K'} - C_\downarrow^K - C_\downarrow^{K'}), \\ C_\xi &= C_\uparrow^K - C_\uparrow^{K'} + C_\downarrow^K - C_\downarrow^{K'}, \\ C_{s\xi} &= \frac{1}{2}(C_\uparrow^K - C_\uparrow^{K'} - C_\downarrow^K + C_\downarrow^{K'}). \end{aligned} \quad (1.7)$$

Donde debe destacarse que los números de Chern de valle y de espín-valle solo están bien definidos en la teoría de Dirac. Esto quiere decir que en el modelo de *tight-binding* no están bien definidos. Por tanto, solo C y C_s son auténticos números de Chern. Podemos ver, en el cuadro 1.2, todas las posibles combinaciones de los números de Chern.

Podemos clasificar los aislantes topológicos según estos cuatro números de la siguiente forma:

- QAH, QSH y SQAH

Son aislantes topológicos: de efecto Hall cuántico anómalo (QAH), de efecto Hall de espín cuántico (QSH) y de efecto Hall cuántico de espín polarizado anómalo (SQAH).

- QVH y QSVH

Se caracterizan porque los números de Chern C y C_s son 0 y tienden a llamarse aislantes triviales. Estos aislantes son: de efecto Hall cuántico de valle (QVH) y los de efecto Hall cuántico de espín-valle (QSVH).

En caso de que no se aplique un campo láser, el siliceno se encontrará en fase topológica QSH (QVH) cuando el potencial eléctrico es menor (mayor) que el acoplamiento espín-órbita.

En presencia de un campo láser de luz circularmente polarizada el siliceno puede encontrarse en un mayor número de fases topológicas recogidas en el cuadro 1.2 [29].

	C_{\uparrow}^K	$C_{\uparrow}^{K'}$	C_{\downarrow}^K	$C_{\downarrow}^{K'}$	C	$2C_S$	C_v	$2C_{sv}$
QAH	1/2	1/2	1/2	1/2	2	0	0	0
SQAH	1/2	1/2	1/2	-1/2	1	1	1	-1
SQAH	1/2	1/2	-1/2	1/2	1	-1	1	1
QVH	1/2	1/2	-1/2	1/2	0	0	2	0
SQAH	1/2	-1/2	1/2	1/2	1	1	-1	1
QSH	1/2	-1/2	1/2	-1/2	0	2	0	0
QSVH	1/2	-1/2	-1/2	1/2	0	0	0	2
SQAH	1/2	-1/2	-1/2	-1/2	-1	1	1	1
SQAH	-1/2	1/2	1/2	1/2	1	-1	-1	-1
QSVH	-1/2	1/2	1/2	-1/2	0	0	0	-2
QSH	-1/2	1/2	-1/2	1/2	0	-2	0	0
SQAH	-1/2	1/2	-1/2	-1/2	-1	-1	-1	-1
QVH	-1/2	-1/2	1/2	1/2	0	0	-2	0
SQAH	-1/2	-1/2	1/2	-1/2	-1	1	-1	-1
SQAH	-1/2	-1/2	-1/2	1/2	-1	-1	-1	1
QAH	-1/2	-1/2	-1/2	-1/2	-2	0	0	0

Cuadro 1.2: Posibles combinaciones de los números de Chern[29].

Capítulo 2

Modelo de Hamiltoniano Efectivo

En este capítulo veremos las herramientas más utilizadas para el estudio de los materiales que estamos considerando. Estas técnicas son: la Teoría del Funcional de la Densidad (o DFT, por sus siglas en inglés) y el método de las ligaduras fuertes (o *tight-binding*). A través de esta última técnica se consigue obtener un hamiltoniano efectivo que nos permitirá estudiar el comportamiento del sistema y que resolveremos con detalle en la sección 3 de este capítulo. Para conseguir nuestro objetivo, caracterizar las transiciones de fase topológicas en materiales de Dirac 2D, utilizaremos las dos técnicas comentadas anteriormente y que pasamos a analizar con más profundidad a continuación.

2.1. Teoría del Funcional de la Densidad

Toda la información necesaria para conocer y describir un sistema físico viene dada por su función de onda. Por tanto, para un sistema formado por n electrones es necesario conocer un total de $4n$ coordenadas ($3n$ espaciales y n de espín). La Teoría del Funcional de la Densidad busca encontrar una función que, igualmente, permita conocer toda la información del sistema y, además, necesite de muchas menos variables para tal fin.

En 1964 Hohenberg y Kohn [30] desarrollaron una teoría que afirma que si conocemos la función densidad del estado fundamental de un sistema podemos conocer, igualmente, toda la información de este (en el estado fundamental), pero con muchas menos coordenadas. DFT pretende obtener la energía del estado fundamental, además de otras propiedades, a través de la densidad electrónica del estado fundamental, ρ_0 .

2.1.1. Primer Teorema de Hohenberg-Kohn

El Hamiltoniano de un sistema de n electrones viene dado por la siguiente expresión

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^n \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^n v(\mathbf{r}_i) + \sum_j \sum_{i>j} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_{ij}}, \quad (2.1)$$

donde m es la masa del electrón, $v(\mathbf{r}_i) = -\sum_{\alpha} Z_{\alpha} e^2 / (4\pi\epsilon_0 r_{i\alpha})$ es el potencial externo (producido por las cargas externas) que representa el potencial de interacción entre los núcleos y el electrón i . El último término representa la energía potencial creada por las repulsiones entre los electrones.

De esta forma, si el número de electrones es fijado y tenemos un potencial externo definido, resolviendo la función de autovalores para el citado Hamiltoniano

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad (2.2)$$

podemos encontrar las funciones de onda de los estados fundamental y excitados.

El primer teorema de Hohenberg y Kohn asegura que [30, 31]: “para sistemas finitos con un estado fundamental no degenerado, la densidad de probabilidad electrónica del estado fundamental, $\rho_0(\mathbf{r})$, determina el potencial externo (excepto en una constante arbitraria)”.

Así, en virtud de este primer teorema, tanto la energía como la función de onda del estado fundamental del sistema vienen determinadas por la función densidad de este. Esto es posible demostrarlo mediante el método de reducción al absurdo suponiendo que existen dos potenciales distintos, v_a y v_b , que proporcionan la misma densidad electrónica del estado fundamental, $\rho_{0,a} = \rho_{0,b} = \rho_0$ [31].

En virtud de este teorema, podemos afirmar que E_0 es un funcional de la función densidad de probabilidad asociada al potencial externo aplicado $v(\mathbf{r})$ y lo denotaremos por

$$E_0 = E_v[\rho_0]. \quad (2.3)$$

Teniendo en cuenta la ecuación del Hamiltoniano (2.1) la expresión para la energía nos quedará

$$E_0 = \left\langle \psi_0 \left| \hat{H} \right| \psi_0 \right\rangle = E_v[\rho_0] = \bar{T}[\rho_0] + \bar{V}_{Ne}[\rho_0] + \bar{V}_{ee}[\rho_0], \quad (2.4)$$

donde $\bar{T}[\rho_0]$, $\bar{V}_{Ne}[\rho_0]$, $\bar{V}_{ee}[\rho_0]$ denotan los valores promedio de cada término de (2.1). Además, teniendo en cuenta que $\hat{V}_{Ne} = \sum_{i=1}^n v(\mathbf{r}_i)$, tenemos

$$\bar{V}_{Ne} = \left\langle \psi_0 \left| \sum_{i=1}^n v(\mathbf{r}_i) \right| \psi_0 \right\rangle = \int \rho_0(\mathbf{r}) v(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (2.5)$$

donde $v(\mathbf{r})$ es la función de la energía potencial de atracción nuclear para un electrón localizado en el punto \mathbf{r} . Por tanto, $\bar{V}_{Ne}[\rho_0]$ se conoce, pero los funcionales $\bar{T}[\rho_0]$ y $\bar{V}_{ee}[\rho_0]$ no. Finalmente, nos queda

$$E_0 = E_v[\rho_0] = \int \rho_0(\mathbf{r})v(\mathbf{r})d\mathbf{r} + \bar{T}[\rho_0] + \bar{V}_{ee}[\rho_0] = \int \rho_0(\mathbf{r})v(\mathbf{r})d\mathbf{r} + F[\rho_0], \quad (2.6)$$

donde se ha definido el funcional $F[\rho_0]$ como $F[\rho_0] \equiv \bar{T}[\rho_0] + \bar{V}_{ee}[\rho_0]$. Siendo este independiente del potencial externo.

Aunque este primer teorema nos señala que la densidad de probabilidad electrónica del estado fundamental determina de forma única el Hamiltoniano de un sistema, no nos indica una forma de proceder para encontrar dicha función densidad debido a que $F[\rho_0]$ es desconocido.

2.1.2. Teorema variacional de Hohenberg-Kohn

Hohenberg y Kohn probaron que para toda función densidad de probabilidad de prueba, ρ_{pr} , que verifique las condiciones $\int \rho_{pr}(\mathbf{r})d\mathbf{r} = n$ y $\rho_{pr}(\mathbf{r}) \geq 0$ para todo \mathbf{r} se cumple la siguiente desigualdad

$$E_0 \leq E_v[\rho_{pr}] \quad (2.7)$$

Alcanzándose la igualdad para la autentica densidad electrónica del estado fundamental, ρ_0 . Por tanto, el teorema variacional de Hohenberg y Kohn dice [30, 31]: "la verdadera densidad electrónica del estado fundamental minimiza el funcional de la energía $E_v[\rho_{pr}]$ ".

2.1.3. Ecuaciones de Kohn-Sham

W. Kohn y L. J. Sham crearon un método para obtener la densidad electrónica, ρ_0 , partiendo de un sistema de referencia ficticio de n electrones que no interactúan entre sí sometidos al mismo potencial, $v_s(\mathbf{r}_i)$ [32]. Este potencial hace que la densidad de probabilidad electrónica del estado fundamental $\rho_s(\mathbf{r})$ del sistema de referencia sea igual a la densidad electrónica del estado fundamental exacta, $\rho_0(\mathbf{r})$, del sistema que queremos estudiar,

$$\rho_s(\mathbf{r}) = \rho_0(\mathbf{r}). \quad (2.8)$$

Puesto que el sistema considerado está formado por electrones que no interactúan entre sí, el Hamiltoniano del sistema de referencia será

$$\hat{H}_s = \sum_{i=1}^n \left[-\frac{\hbar}{2m} \nabla_i^2 + v_s(\mathbf{r}_i) \right] \equiv \sum_{i=1}^n \hat{h}_i^{KS} \quad \text{donde} \quad \hat{h}_i^{KS} \equiv -\frac{\hbar}{2m} \nabla_i^2 + v_s(\mathbf{r}_i), \quad (2.9)$$

siendo \hat{h}_i^{KS} el Hamiltoniano de cada electrón del sistema de Kohn-Sham (electrones de Kohn-Sham). Debido a la configuración del sistema, la función de onda del estado fundamental, $\psi_{s,0}$,

podrá escribirse como un producto antisimetrizado de las autofunciones de Kohn-Sham de menor energía asociadas a los \hat{h}_i^{KS}

$$\psi_{s,0} = |u_1 u_2 \dots u_n|, \quad (2.10)$$

donde los u_i , $u_i = \theta_i^{KS}(\mathbf{r}_i)\sigma_i$, representan los orbitales de espín de Kohn-Sham y satisfacen la ecuación de Shrödinger

$$\hat{h}_i^{KS}\theta_i^{KS}(\mathbf{r}_i) = \mathcal{E}_i^{KS}\theta_i^{KS}(\mathbf{r}_i), \quad (2.11)$$

siendo $\theta_i^{KS}(\mathbf{r}_i)$ la parte espacial de cada orbital de espín y σ_i una función del espín. Definiendo las cantidades $\Delta\bar{T}$, que representa la diferencia de energía cinética que existe entre la del sistema real y el ficticio,

$$\Delta\bar{T}[\rho] \equiv \bar{T}[\rho] - \bar{T}_s[\rho], \quad (2.12)$$

y $\Delta\bar{V}_{ee}[\rho]$, que corresponde al término que concierne a la energía potencial

$$\Delta\bar{V}_{ee}[\rho] \equiv \bar{V}_{ee}[\rho] - \frac{1}{2} \int \int \frac{\rho(\mathbf{r}_1)\rho(\mathbf{r}_2)}{r_{12}} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2, \quad (2.13)$$

donde el segundo término del segundo miembro representa la energía de repulsión electrostática entre los electrones dentro de la distribución del sistema. Podemos reescribir la ecuación de Hohenberg-Kohn de la siguiente forma [31]

$$E_v[\rho] = \int \rho(\mathbf{r})v(\mathbf{r})d\mathbf{r} + \bar{T}_s[\rho] + \frac{1}{2} \int \int \frac{\rho(\mathbf{r}_1)\rho(\mathbf{r}_2)}{r_{12}} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 + \Delta\bar{T}[\rho] + \Delta\bar{V}_{ee}[\rho]. \quad (2.14)$$

Agrupando los funcionales $\Delta\bar{T}$ y $\Delta\bar{V}_{ee}$ (que no son conocidos) en un nuevo término que se define como "funcional de la energía de intercambio y correlación", $E_{xc}[\rho]$,

$$E_{xc}[\rho] \equiv \Delta\bar{T}[\rho] + \Delta\bar{V}_{ee}[\rho]. \quad (2.15)$$

la ecuación de Hohenberg y Kohn queda de la forma [31]

$$E_0 = E_v[\rho] = \int \rho(\mathbf{r})v(\mathbf{r})d\mathbf{r} + \bar{T}_s[\rho] + \frac{1}{2} \int \int \frac{\rho(\mathbf{r}_1)\rho(\mathbf{r}_2)}{r_{12}} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 + E_{xc}[\rho]. \quad (2.16)$$

En esta expresión, $\bar{T}_s[\rho] = \frac{1}{2} \sum_i \langle \theta_i^{KS}(\mathbf{r}_i) | \nabla_i^2 | \theta_i^{KS}(\mathbf{r}_i) \rangle$ representa la energía cinética del sistema de electrones no interactuantes y la función densidad de probabilidad viene dada por

$$\rho = \rho_s = \sum_{i=1}^n |\theta_i^{KS}|^2. \quad (2.17)$$

De este modo, conociendo la función de onda, ψ_s , los orbitales de Kohn-Sham, $\theta_i^{KS}(\mathbf{r}_i)$ y el funcional de energía de intercambio y correlación, $E_{xc}[\rho]$, podremos obtener la energía del sistema.

Los orbitales de Kohn-Sham que minimizan la expresión para la energía del estado fundamental satisfacen [31]

$$\left[\frac{\hbar}{2m} \nabla_i^2 - \sum_{\alpha} \frac{Z_{\alpha}}{r_{i\alpha}} + \int \frac{\rho(\mathbf{r}_2)}{r_{i2}} d\mathbf{r}_2 + v_{xc}(\mathbf{r}_i) \right] \theta_i^{KS}(\mathbf{r}_i) = \mathcal{E}_i^{KS} \theta_i^{KS}(\mathbf{r}_i), \quad (2.18)$$

donde $v_{xc}(\mathbf{r}_i)$ es el "potencial de intercambio y correlación", que se obtiene mediante la derivada del funcional de la energía de intercambio y correlación

$$v_{xc}(\mathbf{r}_i) \equiv \frac{\delta E_{xc}[\rho(\mathbf{r})]}{\delta \rho(\mathbf{r})}. \quad (2.19)$$

Por tanto, lo único que queda por descubrir es la forma que tiene $E_{xc}[\rho]$. Para ello, existen diversas aproximaciones que nos permiten obtenerla, algunas de estas son [31]: aproximación de densidad local (LDA), el método X_{α} o la aproximación de densidad de espín local. Debido a que $E_{xc}[\rho]$ se conoce de forma aproximada los resultados que se obtienen no son exactos, y su veracidad depende de la calidad de las aproximaciones realizadas.

2.2. El método *Tight-Binding*

Mientras que para sistemas formados por unos cuantos cientos de átomos (hasta sistemas formados por algunos miles de estos) la teoría DFT puede funcionar bastante bien, sin embargo, para sistemas compuestos de más de 10^5 átomos DFT deja de ser una herramienta válida. Por este motivo, es necesario utilizar otro formalismo que ayude a describir el comportamiento de sistemas más grandes. Este método es conocido como método de las ligaduras fuertes o *tight-binding*.

El modelo *tight binding* (TB) resulta útil para obtener la estructura de bandas de sólidos cristalinos (y, aunque los resultados no son exactos, dan una buena aproximación de la realidad). TB trata a los materiales (tanto metales como aislantes) como si fuesen un conjunto de átomos neutros que interactúan débilmente entre si. Para utilizar esta teoría se emplea la superposición de un conjunto de funciones de onda base que corresponden a átomos aislados cuya localización se corresponde con las posiciones atómicas.

Para poder aplicar TB con éxito el solapamiento entre las funciones de onda debe ser lo suficientemente fuerte como para que sea necesario añadir correcciones, pero no tanto como para que la aproximación utilizada sea inválida [33]. Además, este modelo es especialmente eficaz en

la descripción de las bandas de energía asociadas a los electrones de las capas d que se encuentran semi-ocupadas en los metales de transición, así como para la descripción de los aislantes.

2.2.1. Hamiltoniano *Tight Binding*

El Hamiltoniano de un átomo dentro de una red cristalina, H_{at} , viene representado por [33, 34]

$$H = H_{at} + \Delta U, \quad (2.20)$$

donde H_{at} corresponde al Hamiltoniano de un átomo aislado y ΔU representa la diferencia entre el potencial real del átomo dentro del cristal y el átomo aislado. En este modelo, ΔU se considera muy pequeño en el entorno de cada átomo y $\Delta U \rightarrow 0$ en el centro de cada uno. Los autoestados del Hamiltoniano del átomo aislado se obtendrán mediante la resolución de la ecuación de autovalores

$$H_{at}\phi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i\phi_i(\mathbf{r}), \quad (2.21)$$

donde $\phi_i(\mathbf{r})$ representan a dichas autofunciones, ε_i representan las autoenergías y el subíndice i representa el nivel de energía. Las autofunciones $\phi_i(\mathbf{r})$ del átomo aislado se supondrán conocidas. Además, estas funciones de onda decaerán rápidamente conforme nos alejamos de la posición del átomo, por tanto, la interacción con las funciones de onda de los demás átomos de la red será muy pequeña (menor cuanto más ligados estén los electrones al núcleo). Puede definirse una integral de solapamiento que representa la interacción de un átomo con sus vecinos de la forma siguiente:

$$\gamma(|\mathbf{R}|) = \int \phi_i^*(\mathbf{r})\phi_j(\mathbf{r} + \mathbf{R})d\mathbf{r}. \quad (2.22)$$

Además, como las funciones de onda se suponen ortonormales [34],

$$\int \phi_i^*(\mathbf{r})\phi_j(\mathbf{r} + \mathbf{R})d\mathbf{r} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \text{ y } \mathbf{R} = 0, \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases} \quad (2.23)$$

Por tanto, cuanto más fuertemente estén ligados los electrones a los átomos menor será el solapamiento entre dichas autofunciones y más efectiva y precisa será esta teoría. De este modo, cualquier corrección que sea necesario realizar debe ser lo suficientemente pequeña como para que pueda ser despreciada sin afectar demasiado al resultado obtenido.

Por otro lado, el Hamiltoniano del cristal vendrá descrito por la suma de los Hamiltonianos de cada átomo

$$H(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}_n} H_{at}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) + \Delta U(\mathbf{r}), \quad (2.24)$$

siendo \mathbf{R}_n la posición de cada átomo dentro de la red cristalina y el efecto del potencial se ha agrupado en un único ΔU . La resolución de la ecuación de Schrödinger para este Hamiltoniano proporcionará las autofunciones $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, esto es

$$H(\mathbf{r})\psi_m(\mathbf{r}) = E_{n\mathbf{k}}\psi_m(\mathbf{r}), \quad (2.25)$$

dónde n representa la banda de energía y \mathbf{k} es un vector de onda en la primera zona de Brillouin. Las soluciones $\psi_{n\mathbf{k}}$ a la ecuación de Schrödinger serán una combinación lineal de orbitales atómicos $\phi_m(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$

$$\psi_m(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}_n} b_m(\mathbf{R}_n)\phi_m(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n), \quad (2.26)$$

donde m hace referencia al nivel de energía del átomo m -ésimo.

2.2.2. Simetría traslacional y normalización

El teorema de Bloch establece que la función de onda dentro de un cristal solo varía en una fase cuando nos desplazamos dentro de las posiciones de sus átomos:

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}_l) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_l}\psi(\mathbf{r}), \quad (2.27)$$

donde \mathbf{k} es el vector de onda de la función de onda. Introduciendo 2.26 en 2.27 obtenemos

$$\sum_{\mathbf{R}_n} b_m(\mathbf{R}_n)\phi_m(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n + \mathbf{R}_l) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_l} \sum_{\mathbf{R}_n} b_m(\mathbf{R}_n)\phi_m(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n). \quad (2.28)$$

Y haciendo el cambio $\mathbf{R}_p = \mathbf{R}_n - \mathbf{R}_l$, se llega a

$$\sum_{\mathbf{R}_n} b_m(\mathbf{R}_p + \mathbf{R}_l)\phi_m(\mathbf{r} - \mathbf{R}_p) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_l} \sum_{\mathbf{R}_n} b_m(\mathbf{R}_n)\phi_m(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n), \quad (2.29)$$

donde podemos cambiar el subíndice n en la sumatoria por p sin que afecte a los cálculos

$$\sum_{\mathbf{R}_p} b_m(\mathbf{R}_p + \mathbf{R}_l)\phi_m(\mathbf{r} - \mathbf{R}_p) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_l} \sum_{\mathbf{R}_p} b_m(\mathbf{R}_p)\phi_m(\mathbf{r} - \mathbf{R}_p), \quad (2.30)$$

por lo que se obtiene la relación $b_m(\mathbf{R}_p + \mathbf{R}_l) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_l}b_m(\mathbf{R}_p)$ que debe cumplirse para cualquier \mathbf{R}_p . Si hacemos $\mathbf{R}_p = \mathbf{0}$ obtenemos

$$b_m(\mathbf{R}_l) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_l}b_m(\mathbf{0}). \quad (2.31)$$

Teniendo en cuenta que la función de onda debe estar normalizada, podemos calcular los coeficientes $b_m(\mathbf{0})$ de la siguiente forma

$$\begin{aligned}
\langle \psi_m(\mathbf{r}) | \psi_m(\mathbf{r}) \rangle &= \int \psi_m^*(\mathbf{r}) \psi_m(\mathbf{r}) d^3r = 1 & (2.32) \\
&= b_m^*(\mathbf{0}) b_m(\mathbf{0}) \sum_{\mathbf{R}_n} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_n} \sum_{\mathbf{R}_l} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_l} \int \phi_m^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \phi_m(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l) d^3r \\
&= N b_m^*(\mathbf{0}) b_m(\mathbf{0}) \sum_{\mathbf{R}_p} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_p} \int \phi_m^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_p) \phi_m(\mathbf{r}) d^3r \\
&= N b_m^*(\mathbf{0}) b_m(\mathbf{0}) \sum_{\mathbf{R}_p} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_p} \int \phi_m^*(\mathbf{r}) \phi_m(\mathbf{r} + \mathbf{R}_p) d^3r.
\end{aligned}$$

Por lo que la normalización establece $b_m(\mathbf{0})$, con esto

$$b_m^*(\mathbf{0}) b_m(\mathbf{0}) = \frac{1}{N} \frac{1}{1 + \sum_{\mathbf{R}_p \neq \mathbf{0}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_p} \alpha_m(\mathbf{R}_p)}, \quad (2.33)$$

siendo $\alpha_m(\mathbf{R}_p) = \int \phi_m^*(\mathbf{r}) \phi_m(\mathbf{r} + \mathbf{R}_p) d^3r$ integrales de solapamiento. Teniendo en cuenta 2.23, estas integrales podrán despreciarse (excepto para $\mathbf{R}_p = \mathbf{0}$ que valdrán 1)

$$\sum_{\mathbf{R}_p} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_p} \alpha_m = 1 + \sum_{\mathbf{R}_p \neq \mathbf{0}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_p} \alpha_m(\mathbf{R}_p) \simeq 1. \quad (2.34)$$

De este modo $b_m(\mathbf{0}) = b_m \approx \frac{1}{\sqrt{N}}$ y los coeficientes $b_m(\mathbf{R}_l)$ son [35]

$$b_m(\mathbf{R}_l) = \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_l}}{\sqrt{N}}. \quad (2.35)$$

Finalmente, la función de onda 2.26 se transforma en [33, 34, 35]

$$\psi_{m\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \approx \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}_n} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_n} \phi_m(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n). \quad (2.36)$$

2.2.3. Bandas de energía

Para obtener las bandas de energía de un cristal basta con calcular los valores esperados del Hamiltoniano del mismo [33], esto es,

$$\varepsilon_m(\mathbf{k}) = \langle \psi_{m\mathbf{k}} | H | \psi_{m\mathbf{k}} \rangle = \int \psi_{m\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) H \psi_{m\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (2.37)$$

Considerando que ε_m es la banda de energía m-ésima dentro del cristal.

$$\begin{aligned}
\varepsilon_m &= \int \psi_{m\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})H(\mathbf{r})\psi_{m\mathbf{k}}(\mathbf{r})d^3r = \sum_{\mathbf{R}_n} \frac{e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_n}}{\sqrt{N}} \int \phi_m^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)H(\mathbf{r})\psi_{m\mathbf{k}}(\mathbf{r})d^3r \quad (2.38) \\
&= \sum_{\mathbf{R}_n} \frac{e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_n}}{\sqrt{N}} \int \phi_m^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \left[\sum_{\mathbf{R}_l} H_{at}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l) \right] \psi_{m\mathbf{k}}(\mathbf{r})d^3r.
\end{aligned}$$

Que aportará dos términos a la banda de energía m-ésima

$$\begin{aligned}
\varepsilon_m &= \sum_{\mathbf{R}_l} \sum_{\mathbf{R}_n} \frac{e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_n}}{\sqrt{N}} \int \phi_m^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)H_{at}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l)\psi_{m\mathbf{k}}(\mathbf{r})d^3r \quad (I) \\
&+ \sum_{\mathbf{R}_n} \frac{e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_n}}{\sqrt{N}} \int \phi_m^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)\Delta U(\mathbf{r})\psi_{m\mathbf{k}}(\mathbf{r})d^3r \quad (II). \quad (2.39)
\end{aligned}$$

Desarrollando el primer término se obtiene:

$$(I) = \sum_{\mathbf{R}_l} \sum_{\mathbf{R}_n} \frac{e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_n}}{\sqrt{N}} \int \phi_m^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)H_{at}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l)\psi_{m\mathbf{k}}(\mathbf{r})d^3r \quad (2.40)$$

$$= \sum_{\mathbf{R}_l} \sum_{\mathbf{R}_n} \sum_{\mathbf{R}_p} \frac{e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_p)}}{N} \int \phi_m^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)H_{at}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l)\phi_m(\mathbf{r} - \mathbf{R}_p)d^3r \quad (2.41)$$

$$= \sum_{\mathbf{R}_l} \sum_{\mathbf{R}_n} \frac{e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_p)}}{N} \int \phi_m^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)E_m\phi_m(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l)d^3r \quad (2.42)$$

$$= \frac{E_m}{N} \sum_{\mathbf{R}_n} \int \phi_m^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)\phi_m(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)d^3r \approx N \frac{E_m}{N} = E_m. \quad (2.43)$$

Haciendo el desarrollo del segundo obtenemos

$$(II) = \sum_{\mathbf{R}_n} \sum_{\mathbf{R}_l} \frac{e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_n)}}{N} \int \phi_m^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)\Delta U(\mathbf{r})\phi_m(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l)d^3r. \quad (2.44)$$

Por lo tanto, nos queda [33]:

$$\varepsilon_m = E_m + \sum_{\mathbf{R}_n} \sum_{\mathbf{R}_l} \frac{e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_n)}}{N} \int \phi_m^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)\Delta U(\mathbf{r})\phi_m(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l)d^3r, \quad (2.45)$$

donde el segundo término del segundo miembro (esto es, (II)) representa las interacciones entre las funciones de onda de los átomos vecinos dentro del cristal.

2.2.4. Hamiltoniano TB en siliceno

De la teoría *tight binding* se puede obtener el Hamiltoniano TB de una monocapa de siliceno bajo la influencia de campos electromagnéticos, el cual viene dado por [22, 26, 29]

$$\begin{aligned}
H_{TB} = & - t \sum_{\langle i,j \rangle \alpha} c_{i\alpha}^\dagger c_{j\alpha} + i \frac{\Delta_{SO}}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle \alpha\beta} \nu_{ij} c_{i\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^z c_{j\beta} \\
& - i \frac{2}{3} \Delta_R \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle \alpha\beta} \mu_{ij} c_{i\alpha}^\dagger (\bar{\sigma} \times \bar{d}_{ij}^0)^z c_{j\beta} + l \sum_{i\alpha} \xi_i E_z^i c_{i\alpha}^\dagger c_{i\alpha}. \quad (2.46)
\end{aligned}$$

En esta expresión, el primer término representa la interacción entre los vecinos más próximos, el segundo el acoplamiento espín-órbita, el tercero es el acoplamiento espín-órbita de Rashba (producido por la geometría de la red cristalina) y el cuarto (y último) termino es el potencial que se genera en la red debido a la aplicación de un campo eléctrico. En la ecuación anterior, $t = 1,6$ eV representa la energía de enlace entre los átomos más cercanos, $\langle i, j \rangle$ indica la suma entre los vecinos más próximos, mientras que $\langle\langle i, j \rangle\rangle$ se refiere a la suma entre los siguientes vecinos más próximos, $c_{i\alpha}^\dagger$ ($c_{i\alpha}$) crea (destruye) un electrón con polarización α en el lugar i , $\Delta_{SO} = 4,2$ meV es el acoplamiento espín-órbita, $\bar{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ son las matrices de Pauli, \bar{d}_i y \bar{d}_j son los vectores que conectan los vecinos más cercanos, $\nu_{ij} = \frac{(\bar{d}_i \times \bar{d}_j)}{|\bar{d}_i \times \bar{d}_j|}$, $\lambda_R = 0,7$ meV es el acoplamiento de Rashba, $\mu_{ij} = \pm 1$ para los lugares A (B) de la red, $\bar{d}_{ij}^0 = \frac{\bar{d}_{ij}}{|\bar{d}_{ij}|}$ es un vector unitario en la dirección del vector que conecta los siguientes vecinos más cercanos y $\xi = \pm 1$ representa al valle en el que nos encontramos. Considerando energías pequeñas y despreciando el término de acoplamiento de Rashba frente al acoplamiento espín-órbita podemos obtener un Hamiltoniano efectivo que representa al sistema, el cual veremos en la siguiente sección.

2.3. Hamiltoniano efectivo

El hamiltoniano efectivo de una monocapa de siliceno bajo la actuación de dos campos (uno eléctrico \mathcal{E}_Z y otro magnético B) perpendiculares a la lámina de siliceno y en la vecindad de los puntos de Dirac, viene dado por la ecuación [22, 26, 29, 36, 37]

$$H_{s\xi} = v_F (\xi \sigma_x \hat{p}_x - \sigma_y \hat{p}_y) - \frac{1}{2} s \xi \Delta_{SO} \sigma_z + \frac{1}{2} \Delta_z \sigma_z. \quad (2.47)$$

Este Hamiltoniano se obtiene mediante una transformada de Fourier del Hamiltoniano TB en el régimen de bajas energías y donde se ha despreciado el acoplamiento de Rashba frente al acoplamiento espín-órbita. En esta ecuación, y del mismo modo que anteriormente, $\xi = 1$ o $\xi = -1$ representa a los valles que corresponden, respectivamente, a los puntos K y K' de la zona de Brillouin, σ_j son las conocidas matrices de Pauli, v_F es la velocidad de Fermi de los fermiones de

Dirac en el siliceno, Δ_{SO} es la interacción espín órbita, que proporciona una masa efectiva para los fermiones de Dirac y, por último, $\Delta_z = l\mathcal{E}_z$ es el salto que se origina al aplicar un campo eléctrico constante \mathcal{E}_z y el cual crea una diferencia de potencial entre las subredes de la red en forma de panal de abeja del siliceno. En el cuadro 1.1 se recogen los valores de la distancia entre los átomos de la red, $d = l/2$, para los diferentes materiales de Dirac bidimensionales, el gap de energía espín-órbita inducido por el acoplamiento espín-órbita intrínseco, y la velocidad de Fermi, siendo esta última una estimación teórica [22, 38, 39, 40].

La aplicación de un campo magnético perpendicular B se implementa por medio del acoplamiento mínimo usual, $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} + e\mathbf{A}$, dónde $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$ es el vector potencial en la aproximación de Landau. El nuevo Hamiltoniano, teniendo en cuenta además que $\Delta_{s\xi} = \frac{\Delta_z - s\xi\Delta_{SO}}{2}$, queda:

$$H_{s\xi} = v_F(\xi\sigma_x(\hat{p}_x - eBy) - \sigma_y\hat{p}_y) + \Delta_{s\xi}\sigma_z. \quad (2.48)$$

Que puede expresarse en forma matricial de la siguiente forma

$$\hat{H}_{s\xi} = \begin{pmatrix} \Delta_{\xi s} & v_F[\xi(\hat{p}_x - eBy) - i\hat{p}_y] \\ v_F[\xi(\hat{p}_x - eBy) + i\hat{p}_y] & -\Delta_{\xi s} \end{pmatrix}. \quad (2.49)$$

Resolviendo la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo en los puntos K y K' para este Hamiltoniano, podemos obtener las autoenergías (niveles de Landau) y los autoestados de dicho Hamiltoniano [37, 41, 42, 43, 44, 45]:

$$E_n^{s\xi} = \begin{cases} \text{sgn}(n)\sqrt{|n|\hbar^2\omega^2 + \Delta_{s\xi}^2}, & n \neq 0, \\ -\xi\Delta_{s\xi}, & n = 0, \end{cases} \quad (2.50)$$

y

$$|n\rangle_{s\xi} = \begin{pmatrix} -iA_n^{s\xi}||n| - \xi_+\rangle \\ B_n^{s\xi}||n| - \xi_-\rangle \end{pmatrix}. \quad (2.51)$$

En estas expresiones, $\xi_{\pm} = (1 \pm \xi)/2$, $||n|\rangle$ denotan los autoestados ortonormales de Fock del oscilador armónico con $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, $\omega = v_F\sqrt{2eB/\hbar}$ es la frecuencia de ciclotrón, $\Delta_{s\xi} \equiv (\Delta_z - s\xi\Delta_{SO})/2$ es la masa de Dirac y representa la banda de menor gap, y las constantes $A_n^{s\xi}$ y $B_n^{s\xi}$ vienen dadas por [37]:

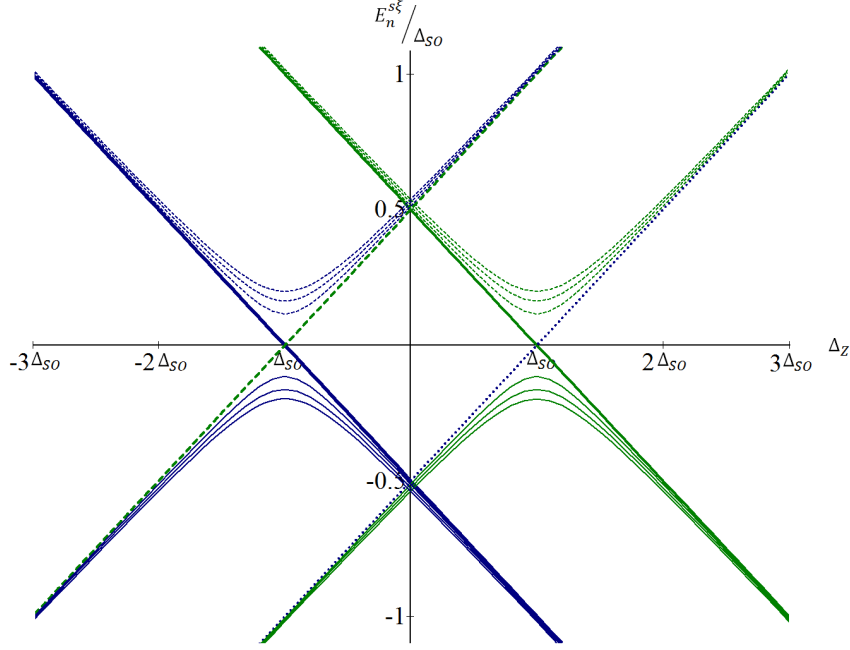


Figura 2.1: Espectro de baja de energía del siliceno en función del potencial eléctrico Δ_Z para un campo magnético $B = 10^{-3}$ T. Se representan los niveles de Landau $n = \pm 1, \pm 2, \pm 3$, para $\xi = 1$, las líneas correspondientes a los electrones son discontinuas (valores de n positivos) y los huecos vienen representados por líneas continuas (valores de n negativos). Las líneas verdes representan los estados con espín positivo ($s = 1$) mientras que las azules representan a los estados con espín negativo ($s = -1$) (En el caso de $\xi = -1$ se obtienen los mismo resultados pero a la inversa). Los niveles de Landau con $n = 0$ vienen representados por las líneas rectas: continuas para el valor $\xi = 1$ y discontinuas para el valor $\xi = -1$.

$$A_n^{s\xi} = \begin{cases} \operatorname{sgn}(n) \sqrt{\frac{|E_n^{s\xi}| + \operatorname{sgn}(n)\Delta_{s\xi}}{2|E_n^{s\xi}|}}, & n \neq 0, \\ \xi_-, & n = 0, \end{cases} \quad (2.52)$$

$$B_n^{s\xi} = \begin{cases} \sqrt{\frac{|E_n^{s\xi}| - \operatorname{sgn}(n)\Delta_{s\xi}}{2|E_n^{s\xi}|}}, & n \neq 0, \\ \xi_+, & n = 0. \end{cases}$$

En la figura 2.1 podemos ver el aspecto que tienen los niveles de Landau en siliceno bajo la influencia de un campo magnético de 10^{-3} T en función del potencial eléctrico aplicado.

Vamos a resolver ahora el problema de autovalores del Hamiltoniano efectivo

$$H_{s\xi} \Psi = \mathcal{E} \Psi, \quad (2.53)$$

donde $\Psi = (\phi_A, \phi_B)$. Desarrollando esto nos queda

$$\hat{H}_{s\xi}\Psi = \begin{pmatrix} \Delta_{s\xi} & v_F[\xi(\hat{p}_x - \frac{e}{c}By) - i\hat{p}_y] \\ v_F[\xi(\hat{p}_x - \frac{e}{c}By) + i\hat{p}_y] & -\Delta_{s\xi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_A \\ \phi_B \end{pmatrix} = \mathcal{E} \begin{pmatrix} \phi_A \\ \phi_B \end{pmatrix}. \quad (2.54)$$

De este sistema se obtienen las ecuaciones

$$\Delta_{s\xi}\phi_A + v_F[\xi(\hat{p}_x - eBy) - i\hat{p}_y]\phi_B = \mathcal{E}\phi_A, \quad (2.55)$$

$$v_F[\xi(\hat{p}_x + eBy) - i\hat{p}_y]\phi_A - \Delta_{s\xi}\phi_B = \mathcal{E}\phi_B. \quad (2.56)$$

Despejando, de una y otra, ϕ_A y ϕ_B tenemos

$$\phi_A = \frac{v_F[\xi(\hat{p}_x - eBy) - i\hat{p}_y]}{\mathcal{E} - \Delta_{s\xi}}\phi_B, \quad (2.57)$$

$$\phi_B = \frac{v_F[\xi(\hat{p}_x - eBy) + i\hat{p}_y]}{\mathcal{E} + \Delta_{s\xi}}\phi_A. \quad (2.58)$$

Introduciendo 2.58 en 2.55 se obtiene

$$\Delta_{s\xi}\phi_A + v_F[\xi(\hat{p}_x - eBy) - i\hat{p}_y]\frac{v_F[\xi(\hat{p}_x - eBy) + i\hat{p}_y]}{\mathcal{E} + \Delta_{s\xi}}\phi_A = \mathcal{E}\phi_A, \quad (2.59)$$

que desarrollando queda

$$v_F[\xi(\hat{p}_x - eBy) + i\hat{p}_y]\frac{v_F[\xi(\hat{p}_x - eBy) - i\hat{p}_y]}{\mathcal{E} - \Delta_{s\xi}}\phi_B - \Delta_{s\xi}\phi_B = \mathcal{E}\phi_B, \quad (2.60)$$

y finalmente se obtiene

$$-\frac{\hbar^2}{2}\phi_A'' + \frac{(\xi eB)^2}{2}\left(y - \frac{p_x}{eB}\right)^2\phi_A = \frac{\mathcal{E}^2 - \Delta_{s\xi}^2 - \xi eB\hbar v_F^2}{2v_F^2}\phi_A. \quad (2.61)$$

Haciendo lo mismo con 2.57 y 2.56 llegamos a la expresión equivalente

$$-\frac{\hbar^2}{2}\phi_B'' + \frac{(\xi eB)^2}{2}\left(y - \frac{p_x}{eB}\right)^2\phi_B = \frac{\mathcal{E}^2 - \Delta_{s\xi}^2 + \xi eB\hbar v_F^2}{2v_F^2}\phi_B. \quad (2.62)$$

Que, como puede apreciarse, son las ecuaciones del oscilador armónico y tendrán por soluciones

$$\phi_A(x, y) = \chi_A(y)e^{ip_x x/\hbar}, \quad (2.63)$$

$$\phi_B(x, y) = \chi_B(y)e^{ip_x x/\hbar}. \quad (2.64)$$

Por tanto, debemos obtener ahora $\chi_A(y)$ y $\chi_B(y)$. Para ello, vamos a resolver la ecuación 2.62 para el caso $\xi = 1$, pudiendo resolverse de la misma forma para $\xi = -1$,

$$-\frac{\hbar^2}{2}\phi_B'' + \frac{(eB)^2}{2}\left(y - \frac{p_x}{eB}\right)^2 \phi_B = \frac{\mathcal{E}^2 - \Delta_{s\xi}^2 + eB\hbar v_F^2}{2v_F^2} \phi_B, \quad (2.65)$$

hacemos el cambio

$$\left(y - \frac{p_x}{eB}\right) = \tilde{y}, \quad dy = d\tilde{y}, \quad (2.66)$$

y nos queda

$$-\frac{\hbar^2}{2}\phi_B''(\tilde{y}) + \frac{\omega}{\hbar}(\tilde{y})^2 \phi_B(\tilde{y}) = \frac{\mathcal{E}^2 - \Delta_{s\xi}^2 + eB\hbar v_F^2}{2v_F^2} \phi_B(\tilde{y}). \quad (2.67)$$

Introduciendo ahora

$$k = (eB)^2, \quad \omega = \sqrt{k}, \quad \alpha = \frac{\mathcal{E}^2 - \Delta_{s\xi}^2 + eB\hbar v_F^2}{2v_F^2}, \quad (2.68)$$

llegamos a

$$\frac{\hbar}{\omega}\phi_B''(\tilde{y}) - \frac{\omega}{\hbar}(\tilde{y})^2 \phi_B(\tilde{y}) = -\frac{2\alpha}{\hbar\omega}\phi_B(\tilde{y}). \quad (2.69)$$

Haciendo de nuevo un cambio de variable:

$$\sqrt{\frac{\omega}{\hbar}}\tilde{y} = x, \quad \frac{\partial\phi_B(\tilde{y})}{\partial\tilde{y}^2} = \frac{\omega}{\hbar}\frac{\partial^2\phi_B(x)}{\partial x^2}, \quad \frac{2\alpha}{\hbar\omega} = \lambda, \quad (2.70)$$

se obtiene

$$\phi_B''(x) - x^2\phi_B(x) = -\lambda\phi_B(x), \quad (2.71)$$

$$\phi_B''(x) + (\lambda - x^2)\phi_B(x) = 0. \quad (2.72)$$

Resolviendo para el caso $x \rightarrow \infty$, donde $x^2 \gg \lambda$, se obtiene:

$$\phi_B''(x) - x^2\phi_B(x) = 0, \quad (2.73)$$

cuya solución es

$$\phi_B = C \exp(-x^2/2), \quad (2.74)$$

y como solución general tendremos

$$\phi_B = CH_n \exp(-x^2/2), \quad (2.75)$$

donde H_n es un polinomio de grado n y C es una constante. Si introducimos esta solución en la ecuación 2.72

$$\begin{aligned} \phi_B''(x) + (\lambda - x^2)\phi_B(x) &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} CH_n(x)e^{-x^2/2} + CH_n(x)e^{-x^2/2} = 0 \\ \rightarrow e^{-x^2/2}C [H_n''(x) - H_n'(x)x - H_n(x) - xH_n'(x) + x^2H_n(x)] + (\lambda - x^2)CH_n(x)e^{-x^2/2} &= 0, \end{aligned}$$

que despejando da

$$H_n''(x) - 2xH_n'(x) + (\lambda - 1)H_n(x) = 0, \quad (2.76)$$

que llevaría a

$$\sum_{i=2} i(i-1)a_i x^{i-2} - 2 \sum_{i=1} i a_i x^i + (\lambda - 1) \sum_{i=0} a_i x^i = 0, \quad (2.77)$$

lo que nos proporciona la siguiente relación entre los coeficientes,

$$(s+2)(s+1)a_{s+2} - 2sa_s + (\lambda - 1)a_s = 0, \quad (2.78)$$

con

$$a_{s+2} = \frac{2s - \lambda + 1}{(s+2)(s+1)} a_s. \quad (2.79)$$

El grado máximo de este polinomio de grado n se alcanzará para un λ que haga cero la ecuación $2s - \lambda + 1 = 0$. Por tanto

$$2n + 1 - \lambda = 0 \rightarrow \lambda = 2n + 1, \quad (2.80)$$

con esto nos queda

$$\lambda = \frac{2\alpha}{\hbar\omega} = 2n + 1 \quad (2.81)$$

$$\alpha_n = \hbar\omega(n + 1/2). \quad (2.82)$$

Los $H_n(x)$ que verifican esto son los llamados polinomios de Hermite. Por lo que finalmente nos queda:

$$\phi_B(x) = CH_n(x)e^{-x^2/2} \Rightarrow CH_n\left(\sqrt{\frac{\omega}{\hbar}}\tilde{y}\right)e^{-\frac{\omega\tilde{y}^2}{2\hbar}} = \phi_B(\tilde{y}). \quad (2.83)$$

A través de la normalización de la función de onda obtenemos C

$$\int |\phi_B(\tilde{y})|^2 d\tilde{y} = C^2 2^n n! \sqrt{\frac{\pi\hbar}{\omega}} = 1 \Rightarrow C = \frac{(\omega/\hbar)^{1/4}}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}}. \quad (2.84)$$

y haciendo el cambio $\omega' = \omega/\hbar$ se llega a

$$\phi_{B_n}(\tilde{y}) = \frac{(\omega')^{1/4} e^{-\omega'\tilde{y}^2/2}}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(\sqrt{\omega'}\tilde{y}). \quad (2.85)$$

Podemos hacer el mismo procedimiento para ϕ_A (ecuación 2.61), lo que nos lleva a:

$$\phi_A(x) + (\lambda' - x^2)\phi_A(x) = 0, \quad (2.86)$$

$$\lambda' = \frac{2\alpha'}{\hbar\omega} = 2m + 1 \Rightarrow \alpha'_m = \hbar\omega(m + 1/2). \quad (2.87)$$

De 2.87 y 2.81 podemos ver que se cumple:

$$\alpha_n = \alpha'_{n-1}. \quad (2.88)$$

Podemos comprobarlo a través de

$$\alpha_n = \frac{\mathcal{E}^2 - \Delta_{s\xi}^2 + eB\hbar v_F^2}{2v_F^2} = \hbar\omega(n + 1/2), \quad (2.89)$$

y

$$\alpha'_m = \frac{\mathcal{E}^2 - \Delta_{s\xi}^2 - eB\hbar v_F^2}{2v_F^2} = \hbar\omega(m + 1/2). \quad (2.90)$$

Despejando \mathcal{E} en 2.89 obtenemos las energías permitidas de este sistema

$$\mathcal{E}_n = E_n^{s\xi} = \pm \sqrt{\Delta_{s\xi}^2 + 2|n|eB\hbar v_F^2}. \quad (2.91)$$

Que son las energías de los niveles de Landau. Introduciendo 2.91 en 2.90 y desarrollando se verifica 2.88.

Podemos ahora reescribir la forma de Ψ como:

$$\Psi_n = \begin{pmatrix} C_1 \phi_{n-1} \\ C_2 \phi_n \end{pmatrix}, \quad (2.92)$$

siendo C_i constantes de normalización. Por lo que, estando ϕ_n normalizada:

$$\phi_n(\tilde{y}) = \frac{(\omega)^{1/4} e^{-\omega\tilde{y}/2}}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(\sqrt{\omega}\tilde{y}), \quad (2.93)$$

y exigiendo que Ψ_n también lo esté, es decir,

$$\int (|C_1|^2 |\phi_{n-1}|^2 + |C_2|^2 |\phi_n|^2) d\tilde{y} = |C_1|^2 + |C_2|^2 = 1. \quad (2.94)$$

Con esto, se establece que C_1 y C_2 tienen que ser [?]:

$$C_1 = A_n^{s\xi} = \begin{cases} \text{sgn}(n) \sqrt{\frac{|E_n^{s\xi}| + \text{sgn}(n) \Delta_{s\xi}}{2|E_n^{s\xi}|}}, & n \neq 0, \\ \xi_-, & n = 0, \end{cases} \quad (2.95)$$

$$C_2 = B_n^{s\xi} = \begin{cases} \sqrt{\frac{|E_n^{s\xi}| - \text{sgn}(n) \Delta_{s\xi}}{2|E_n^{s\xi}|}}, & n \neq 0, \\ \xi_+, & n = 0. \end{cases}$$

Sabemos que los estados de Fock $|n\rangle$ pueden escribirse en la representación de posiciones como [43]

$$\langle x|n\rangle = \frac{\omega^{1/4} e^{-\omega x^2/2}}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(\sqrt{\omega}x), \quad (2.96)$$

donde H_n son los polinomios de Hermite de grado n . Con esto podemos introducir la densidad de estados en el espacio de posiciones como

$$\rho_n = |\langle x|n\rangle|^2, \quad (2.97)$$

(con $\int \rho_n dx = 1$). Así, la densidad de estados en el espacio de posiciones para nuestro sistema queda

$$\rho_n^{s\xi}(x) = |\langle x|n\rangle_{s\xi}|^2 = (A_n^{s\xi})^2 |\langle x||n| - \xi_+\rangle|^2 + (B_n^{s\xi})^2 |\langle x||n| - \xi_-\rangle|^2. \quad (2.98)$$

Podemos obtener, de la misma forma, la densidad de energía en el espacio de posiciones. Para ello, ahora debemos considerar que

$$\langle p|n\rangle = \frac{\omega^{-1/4}e^{-p^2/2\omega}}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(p/\sqrt{\omega}) \quad (2.99)$$

y que la densidad vendrá dada por

$$\gamma_n = |\langle p|n\rangle|^2, \quad (2.100)$$

(con $\int \gamma_n dx = 1$) con lo que la densidad de estados en el espacio de posiciones para nuestro sistema queda

$$\gamma_n^{s\xi}(x) = (A_n^{s\xi})^2 |\langle p||n| - \xi_+\rangle|^2 + (B_n^{s\xi})^2 |\langle p||n| - \xi_-\rangle|^2. \quad (2.101)$$

Hamiltoniano efectivo con un campo láser

Se ha estudiado la respuesta óptica que produce un haz láser de luz circularmente polarizada en los materiales de Dirac bidimensionales [46, 47]. La interacción del haz láser queda bien definida mediante la constante de acoplamiento Λ

$$\Lambda = \pm 8\pi\alpha v_F^2 \frac{I}{\omega^3}, \quad (2.102)$$

siendo I la intensidad del Láser, ω la frecuencia de este y α la constante de estructura fina. Esta expresión será válida siempre que $4|\Lambda|\hbar\omega/3t^2 \ll 1$. La constante de acoplamiento produce una contribución a la masa de Dirac que viene dada por

$$\Delta_{s\xi} = \frac{\Delta_z - \Delta_{s\xi} + \xi\lambda}{2}, \quad (2.103)$$

donde se ha utilizado $\lambda = 2\Lambda$. El procedimiento para resolver el Hamiltoniano que ahora tenemos es el mismo que el descrito anteriormente, solo que ahora la masa de Dirac tiene una expresión ligeramente diferente. Hay que resaltar que, aunque la apariencia del Hamiltoniano no varía demasiado al introducir un haz de luz láser circularmente polarizada, las causas que hacen que $\Delta_{s\xi}$ varíe son diferentes y las propiedades del sistema cambian. Es más, nuestro sistema podrá encontrarse en fases topológicas diferentes en los casos en los que se aplica un campo láser respecto de las que se encuentran cuando este no se aplica [47].

Capítulo 3

Caracterización de transiciones de fase topológicas mediante corrientes electrónicas y Fidelidad

El estudio de magnitudes físicas relacionadas con la evolución temporal de paquetes de onda es una herramienta fundamental en el estudio y desarrollo de dispositivos electrónicos. Por este motivo, en este capítulo se presentan los estudios basados en el análisis de la corriente electrónica y en la Fidelidad.

3.1. Corrientes

El comportamiento de corrientes electrónicas generadas por paquetes de onda gaussianos ha sido estudiado en sistemas formados por grafeno bajo la influencia de campos magnéticos [48, 49, 50, 51]. En este tipo de sistemas, las corrientes electrónicas viene dada por las expresiones:

$$j_x = ev_F \langle \sigma_x \rangle \quad \text{y} \quad j_y = ev_F \langle \sigma_y \rangle, \quad (3.1)$$

donde e representa la carga del electrón, v_F es la velocidad de Fermi y σ_a son las matrices de Pauli (con $a = x, y$). En estos sistemas, se ha podido comprobar que aparecen varias escalas temporales en la evolución temporal de la corriente, estas son: Zitterbewegung, clásica y revival. La periodicidad clásica, $T_{CL} = 2\pi\hbar/|E'_{n_0}|$, se corresponde con el periodo que aparece en el movimiento clásicamente esperado para los electrones dentro del material. La de revival, $T_R = 4\pi\hbar/|E''_{n_0}|$, representa el tiempo que debe transcurrir para que el paquete de onda presente la misma apariencia que tenía en el instante inicial. Por último, la periodicidad Zitterbewegung, $T_{ZB} = \pi\hbar/|E_{n_0}|$, solo tiene sentido para paquetes de onda centrados en dos niveles (uno positivo y otro negativo, paquetes tipo gato) y representa un movimiento oscilatorio en torno a la trayectoria que siguen los

fermiones de Dirac dentro del sistema.

Nosotros hemos estudiado las corrientes electrónicas producidas por paquetes de onda Gaussianos en un sistema compuesto por una lámina de siliceno bajo la influencia de campos electromagnéticos perpendiculares. Las propiedades observadas, tanto para las periodicidades de las corrientes como para las amplitudes de las mismas, han resultado ser una herramienta válida en la labor de caracterizar las transiciones de fase topológicas en siliceno, pudiendo extender los resultados obtenidos al resto de materiales de Dirac 2D.

Los resultados obtenidos han sido publicado en el artículo:

E. Romera, **J. C. Bolívar**, J. B. Roldán and F. de los Santos, Revivals of electron currents and topological-band insulator transitions in 2D gapped Dirac materials, *Europhysics Letters*, **115**, 20008 (2016).

DOI: <https://doi.org/10.1209/0295-5075/115/20008>

Revivals of electron currents and topological-band insulator transitions in 2D gapped Dirac materials

E. Romera

*Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear and
Instituto Carlos I de Física Teórica y Computacional,
Universidad de Granada, Fuentenueva s/n 18071 Granada, Spain*

J. C. Bolívar

*Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear &
Instituto Carlos I de Física Teórica y Computacional,
Universidad de Granada, Fuentenueva s/n 18071 Granada, Spain*

J. B. Roldán

*Departamento de Electrónica y Tecnología de Computadores & CITIC,
Universidad de Granada. Fuentenueva s/n, 18071 Granada, Spain*

F. de los Santos

*Departamento de Electromagnetismo y Física de la Materia, Fuentenueva s/n,
18071 Granada, Spain Departamento de Electromagnetismo y Física de la Materia,
Fuentenueva s/n, 18071 Granada, Spain*

Abstract

We have studied the time evolution of electron wave packets in silicene under perpendicular magnetic and electric fields to characterize topological-band insulator transitions. We have found that at the charge neutrality points, the periodicities exhibited by the wave packet dynamics (classical and revival times) reach maximum values, and that the electron currents reflect the transition from a topological insulator to a band insulator. This provides a signature of topological phase transition in silicene that can be extended to other 2D Dirac materials isostructural to graphene and with a buckled structure and a significant spin-orbit coupling.

I. INTRODUCTION

In recent years, there has been a lot of activity in the study of stable 2D materials isostructural to graphene. In particular, there has been much theoretical and experimental progress in the study of silicene, an allotrope of silicon showing a two-dimensional honeycomb-like lattice similar to that of graphene but with a buckled structure [1–3] and a significant intrinsic spin-orbit coupling (see the review [4]). Silicene can be described by a Dirac-type Hamiltonian with an estimated Fermi velocity $v_F = 10^6 \text{ ms}^{-1}$. It has a buckling length $l = 0.44 \text{ \AA}$, which allows the band structure to be controlled by applying an electric field perpendicular to the silicene monolayer. More specifically, it possesses a tunable band gap that changes linearly with the electric field intensity and that reaches a zero value for a critical value of the electric field, at which the spins are perfectly polarized, up or down, at the two inequivalent corners of the Brillouin zone K and K' , respectively [5]. Moreover, silicene undergoes a topological phase transition [6] (TPT) from a topological insulator (TI) to a trivial band insulator (BI), at the so-called charge neutrality point (CNP). Silicene field-effect transistors operating at room temperature have been observed experimentally in silicene grown on metallic substrates [4, 7]. Recently, it has been shown that a biaxial strain can be utilized to tune the spin-orbit coupling in silicene and hence its TPT [8]. Other gapped, Dirac materials having a structure similar to that of silicene and with exceptional properties are metastable germanene (Ge), metastable tinene (Sn) [9], and indiene (In) [10].

Two-dimensional topological insulators were theoretically predicted by Kane and Melle [11] using a model of a two-dimensional material isostructural to graphene and with a spin-orbit interaction. They were first observed experimentally in mercury telluride quantum wells [12] and later on in other materials (see [13] and references therein). Topological insulators have a bulk energy gap but their edge states (also known as surface states) are gapless. TI-BI transitions are characterized by a band inversion with a level crossing at some critical value of a control parameter, say electric field, quantum well thickness, etc. Recently, theoretic information measures and uncertainty relations has been used to characterize TPTs [14–17].

The possibility of creating and manipulating wave packets has increased dramatically over the last years, due in part to tunable lasers. To cite but a few examples, lasers can now create wave packets associated with a variety of quantum states that were unimaginable a

few years ago, their time evolution can be controlled within strikingly short time periods, and even the phase between the wave packets components can be modified. Additionally, the ability to excite wave packets into the high energy levels allows the quantum to classical boundary to be explored. In this respect, detecting the quantum revivals and fractional revivals of wave packets during their time evolution has become a feasible, useful tool at the root of various applications and in-depth analyses of quantum systems as well [18–23]. In this paper, we have identified the TI-BI transition in silicene by studying the revivals in the dynamics of electronic wave packets and in the amplitude of electron currents. Our results carry over to other two-dimensional Dirac materials such as germanene or tinene.

This paper is organized as follows. In Section II we present the effective, low energy Hamiltonian for monolayer silicene under external magnetic and electric fields. The relation between wave packet revivals and TPTs is then discussed in Section III. Section IV studies how the occurrence of revivals affects the electron currents, and, in turn, how this relates to TPTs. A summary with our conclusions is presented in a final section.

II. LOW ENERGY HAMILTONIAN

The effective Hamiltonian for monolayer silicene in an external electric field, \mathcal{E}_z , perpendicular to the silicene sheet and in the vicinity of the Dirac points is given by [24, 25]

$$H_s^\xi = v_F(\xi\sigma_x p_x - \sigma_y p_y) - \frac{1}{2}\xi s\Delta_{\text{so}}\sigma_z + \frac{1}{2}\Delta_z\sigma_z. \quad (1)$$

Here, $\xi = 1$ or $\xi = -1$ corresponds, respectively, to the two inequivalent corners K and K' of the Brillouin zone, σ_j are the Pauli matrices, $s = \pm 1$ is the spin, v_F is the Fermi velocity of the Dirac fermions, Δ_{so} is the spin-orbit interaction, which provides an effective mass to the Dirac fermions and, finally, $\Delta_z = l\mathcal{E}_z$ is the gap that originates from the application of the constant electric field \mathcal{E}_z and which creates a potential difference between both sub-lattices of the silicene honeycomb lattice. Table (I) gathers the values for different 2D Dirac materials of interlattice distance, l , the spin-orbit energy gap induced by the intrinsic spin-orbit coupling, and the Fermi velocity, the latter being theoretical estimations [10, 24, 26, 27].

The application of a perpendicular magnetic field B is implemented through the standard minimal coupling, $\vec{p} \rightarrow \vec{p} + e\vec{A}$, where $\vec{A} = (-By, 0, 0)$ is the vector potential in the Landau

	Δ_{so} (meV)	l (Å)	v_F (10^5m/s)
Si	4.2	0.22	4.2
Ge	11.8	0.34	8.8
Sn	36.0	0.42	9.7

TABLE I: Parameters Δ_{so} (spin-orbit coupling), l (interlattice distance) [10] and v_F (Fermi velocity) [28, 29] for monolayer Si (silicene), Ge (germanene) and Sn (tinene).

gauge. The new Hamiltonian reads

$$H_s^\xi = v_F(\xi\sigma_x(p_x - eBy) - \sigma_y p_y) - \frac{1}{2}\xi s\Delta_{\text{so}}\sigma_z + \frac{1}{2}\Delta_z\sigma_z. \quad (2)$$

and the Hamiltonian eigenvalues and eigenvectors for the K and K' points are given by [6, 14–17, 25]

$$E_n^{s\xi} = \begin{cases} \text{sgn}(n)\sqrt{|n|\hbar^2\omega^2 + \Delta_{s\xi}^2}, & n \neq 0, \\ -\xi\Delta_{s\xi}, & n = 0, \end{cases} \quad (3)$$

and

$$|n\rangle_{s\xi} = \begin{pmatrix} -iA_n^{s\xi}||n| - \xi_+\rangle \\ B_n^{s\xi}||n| - \xi_-\rangle \end{pmatrix}. \quad (4)$$

In the above expressions, $\xi_\pm = (1 \pm \xi)/2$, $||n|\rangle$ denotes an orthonormal Fock eigenstate of the harmonic oscillator with $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, $\omega = v_F\sqrt{2eB/\hbar}$ is the cyclotron frequency, $\Delta_{s\xi} \equiv (\Delta_z - s\xi\Delta_{\text{so}})/2$ is the lowest band gap, and the constants $A_n^{s\xi}$ and $B_n^{s\xi}$ are given by [25]

$$A_n^{s\xi} = \begin{cases} \text{sgn}(n)\sqrt{\frac{|E_n^{s\xi}| + \text{sgn}(n)\Delta_{s\xi}}{2|E_n^{s\xi}|}}, & n \neq 0, \\ \xi_-, & n = 0, \end{cases} \quad (5)$$

$$B_n^{s\xi} = \begin{cases} \sqrt{\frac{|E_n^{s\xi}| - \text{sgn}(n)\Delta_{s\xi}}{2|E_n^{s\xi}|}}, & n \neq 0, \\ \xi_+, & n = 0. \end{cases}$$

It has been theoretically established [5, 24, 26, 27] that silicene undergoes a phase transition from a topological insulator (TI, $|\Delta_z| < \Delta_{\text{so}}$) to a band insulator (BI, $|\Delta_z| > \Delta_{\text{so}}$) when $|\Delta_{s\xi}|$ goes to zero at the CNPs, $\pm\Delta_z^{(0)}$, and it is also known that this TPT entails an energy band inversion. In the following section, we analyze how the revival time scales are

affected by traversing a TPT, and consequently how the former and the electron currents can be used to characterize the CNPs .

III. REVIVALS AND TOPOLOGICAL PHASE TRANSITIONS

Let us consider the time evolution of a wave packet for a timeindependent Hamiltonian

$$|\Psi(t)\rangle_{s\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n^{(s\xi)} |n\rangle_{s\xi} e^{-iE_n^{s\xi}t}, \quad (6)$$

with $c_n^{(s\xi)} = \langle n, \Psi \rangle_{s\xi}$. Hereinafter, we shall take s and ξ fixed, and $E_n^{s\xi}$ and $c_n^{(s\xi)}$ will be referred to as E_n and c_n . If the initial wave packet is Gaussianly distributed around a given energy E_{n_0} of the spectrum E_n , that is,

$$c_n = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-(n-n_0)^2/2\sigma^2}, \quad (7)$$

then it is legitimate to Taylor expand around the energy level n_0 , after which one obtains [30]

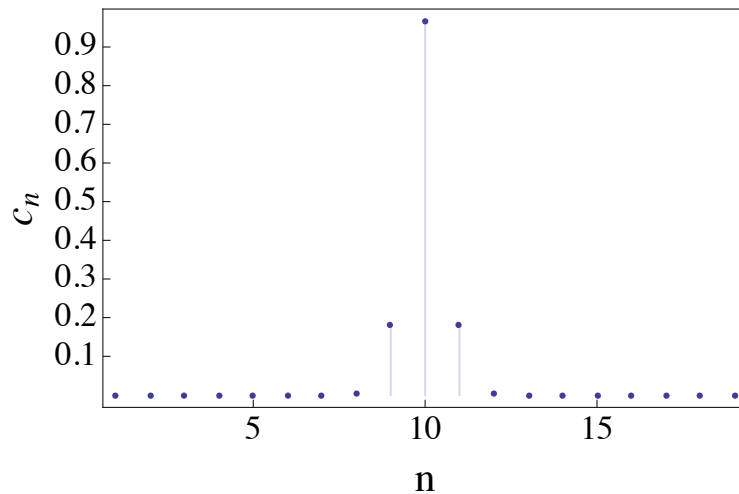


FIG. 1: (color online) c_n coefficients for $n = 0, 2, \dots, 40$.

$$E_n \approx E_{n_0} + E'_{n_0}(n - n_0) + \frac{E''_{n_0}}{2}(n - n_0)^2 + \dots \quad (8)$$

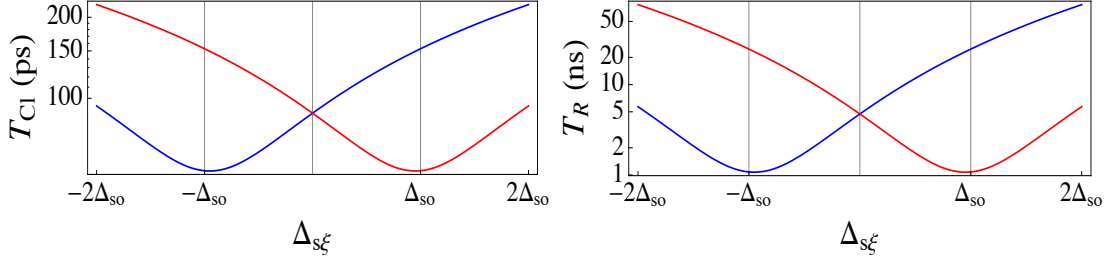


FIG. 2: (color online) Classical period, T_{Cl} (top) and revival times, T_R (bottom), for $n_0 = \pm 10$ and $-2\Delta_{so} \leq \Delta_{s\xi} \leq 2\Delta_{so}$. In either case, $B = 10^{-3}$ T and $\xi = 1$. Blue lines stand for $s = -1$ while the red ones correspond to $s = 1$.

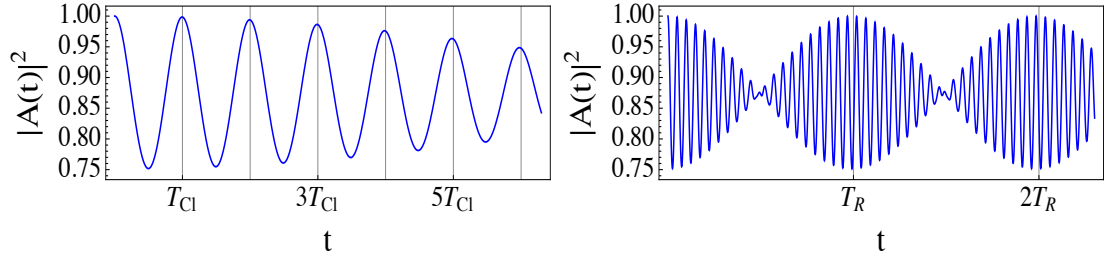


FIG. 3: (color online) Classical behavior (top) and revivals (bottom) of $|A(t)|^2$ for $n_0 = \pm 10$, $B = 10^{-3}$ T, $\Delta_z = -\Delta_{so}$, $s = -1$, and $\xi = 1$.

Consequently,

$$\begin{aligned} & \exp(-iE_n t) = \\ & \exp\left(-i\left[E_{n_0} + E'_{n_0}(n - n_0) + \frac{E''_{n_0}}{2}(n - n_0)^2 + \dots\right] \frac{t}{\hbar}\right) \\ & \exp\left(-iE_{n_0} \frac{t}{\hbar} - \frac{2\pi i(n - n_0)t}{T_{Cl}} - \frac{2\pi i(n - n_0)^2 t}{T_R} + \dots\right). \end{aligned} \quad (9)$$

Here, each term determines a characteristic temporal scale (apart from the first one which is a global phase in Eq. (6)). Specifically, the so-called revival time, $T_R \equiv 2\pi\hbar/|E''_{n_0}|$, is the time the wave packet needs to return approximately to its initial shape. The classical period, $T_{Cl} \equiv 2\pi\hbar/|E'_{n_0}|$, is the time the wave packet needs to follow the expected semiclassical trajectory (see [30] and references therein for more details). We have studied revivals and the quasiclassical periodicity in monolayer silicene. To this purpose, we have chosen as the initial state a wave packet with energy levels Gaussian-like populated around level n_0 and

using the Fermi energy as the energy origin. For the sake of illustration, the particular case $n_0 = 10$ is shown in Fig. 1. The calculated classical and revival periods are given, respectively, by:

$$T_{\text{Cl}} = \frac{4\pi\sqrt{|n|\hbar^2\omega^2 + \Delta_{s\xi}^2}}{\hbar\omega^2}, T_{\text{R}} = \frac{8\pi\sqrt{|n|\hbar^2\omega^2 + \Delta_{s\xi}^2}^3}{\hbar^3\omega^4}. \quad (10)$$

To visualize the time evolution of the wave packets we use the autocorrelation function,

$$A(t) = \langle \Psi(t) | \Psi(0) \rangle. \quad (11)$$

Now, considering again the time evolution as given in Eq. (6), $A(t)$ can be simply written as

$$A(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |c_n|^2 e^{-iE_n t}. \quad (12)$$

In our analysis of the wave packet evolution, we have used a population that comprises both positive and negative energy levels, localized around $n_0 = \pm 10$ (as in Fig. 1) and with $\sigma = 0.54$ in Eq. (7). We have restricted to the K valley of the monolayer and considered a constant, perpendicular magnetic field $B = 10^{-3}$ T and varying values of the external perpendicular electric field, Δ_z . In Fig. 2 we plot T_{Cl} and T_{R} (notice the logarithmic scale) as a function of the electric field Δ_z for the spin-up ($s = 1$, red) and the spin-down ($s = -1$, blue) cases. It can be observed that T_{R} and T_{Cl} reach a minimum value at the critical value of the electric field $\Delta_z = \Delta_{s0}$ for spin up electrons, and $\Delta_z = -\Delta_{s0}$ for spin down electrons. Therefore, the revival and classical periods can be used to identify the CNPs, $\pm\Delta_{s0}$, reaching minima at the critical points and characterizing the TPT.

Figure 3 shows the autocorrelation function for $\Delta_z = -\Delta_{s0}$, $s = -1$ where the two different panels correspond to different time scales: the top panel depicts the classical behavior with $T_{\text{Cl}} = 53.71$ ps, while the bottom panel reproduces the revivals of the wave packet at times of the order of the nanosecond $T_{\text{R}} = 1.07428$ ns.

IV. ELECTRON CURRENTS AND TOPOLOGICAL PHASE TRANSITIONS

We have also investigated how changes in the electric field affect the electron currents along with their time evolution. The x and y components of the currents are given by

$$j_x = ev_F \langle \sigma_x \rangle, \text{ and, } j_y = ev_F \langle \sigma_y \rangle, \quad (13)$$

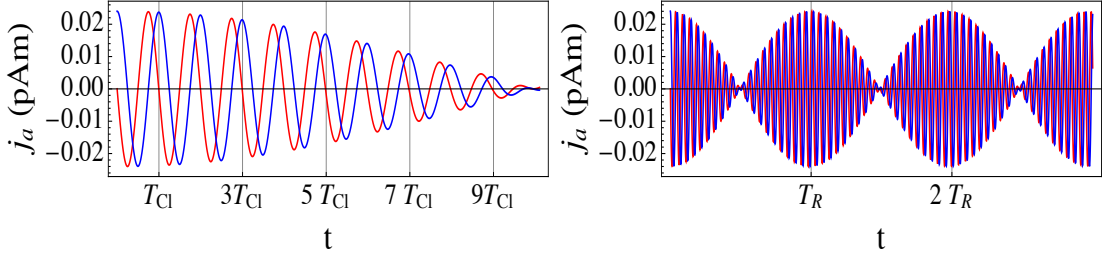


FIG. 4: (color online) Classical behavior (top) and revivals (bottom) for the electron currents j_a for $a = x$ (red) and $a = y$ (blue), for $n_0 = \pm 10$, $B = 10^{-3}$ T, $\Delta_z = -\Delta_{so}$, $s = -1$ and $\xi = 1$.

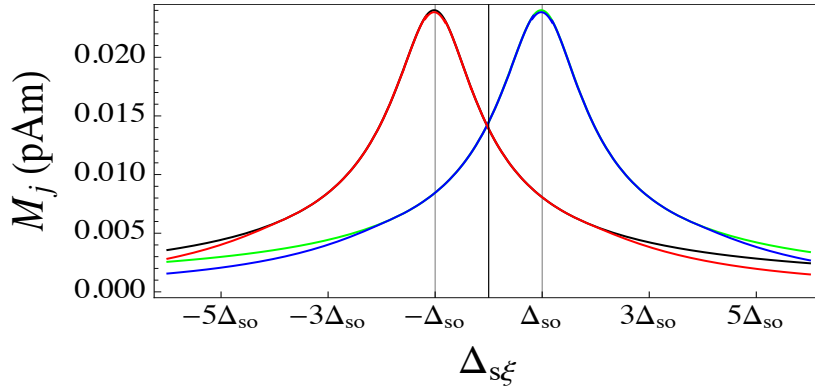


FIG. 5: (color online) Maximum value of the electron current amplitudes M_j , for $n_0 = \pm 10$, $B = 10^{-3}$ T, for $-4\Delta_{so} \leq \Delta_z \leq 4\Delta_{so}$ for $j = x$, $s = 1$ (green), $j = x$, $s = -1$ (black) $j = y$, $s = 1$ (blue) and $j = y$, $s = -1$ (red) and $\xi = 1$.

where σ_x and σ_y are the Pauli matrices. One readily finds,

$$j_x = ev_F \sum_{n,m=-\infty}^{\infty} i c_n c_m e^{i(E_m^{s\xi} - E_n^{s\xi})t} (U_{n,m}^{s\xi} - U_{m,n}^{s\xi}) \quad (14)$$

$$j_y = ev_F \sum_{n,m=-\infty}^{\infty} c_n c_m e^{i(E_m^{s\xi} - E_n^{s\xi})t} (U_{n,m}^{s\xi} + U_{m,n}^{s\xi}) \quad (15)$$

with $U_{n,m}^{s\xi} = A_m^{s\xi} B_n^{s\xi} \delta_{|m|-1,|n|}$.

Fig. 4 presents j_x and j_y for the same initial wave packet as in the previous section. First, we can see the quasiclassical oscillations over periods T_{Cl} . For larger times, the figure clearly shows a regeneration of the initial amplitude of the electronic current at T_R . This same behavior has been found in graphene previously [31, 32] and in the case of silicene under only a magnetic field [33].

In order to study the effect of the electric field on the electron currents, we have performed calculations for different values of Δ_z and studied the amplitudes of the electron currents. We have found the maxima of the current amplitudes, M_x and M_y , are located at the CNP Δ_{so} ($-\Delta_{so}$) for $s = 1$ ($s = -1$). This behavior is shown in Fig. 5 for both j_x and j_y for $B = 10^{-3}$ T where we have plotted M_x and M_y in terms of Δ_z finding a maximum value (around 0.025 pAm) at the CNP. We have verified that this result remains valid for other values of the magnetic field. This results can be used as as characterization of the TPT in terms of the amplitude of the electron currents.

For the experimental characterization of the system under study here, low resistance ohmic contacts would be needed, see H. Chuang et al. [34] for details on this issue. The characterization by experimental means of the current components described in Eqs. (12)-(14) would help to understand the nature of the effects taking place in the system. Quantum interference devices [35] can be built making use of the system properties highlighted in Figure 5. In this respect, applications for the frequencies associated to the revival times could be envisaged.

V. CONCLUSIONS

We have shown that the evolution of wave packets can be used as a tool to characterize topological band-insulator transitions in silicene, and by extension we argue that the same applies to analogous 2D Dirac materials as germanene (Ge) tinene (Sn) or Indiene (In). In particular, we have used an effective Hamiltonian model to analyze the time evolution of electron wave packets in a monolayer of silicene under perpendicular electric and magnetic fields. Two different periodicities appear in this system, the classical and revival times. Both quantities reach a maximum at the CNP Δ_{so} ($-\Delta_{so}$) for $s = 1$ ($s = -1$), thus providing a characterization of the TPT. Moreover, the behavior of the amplitudes of the electron currents, j_x and j_y , for different values of the electric field provides an additional characterization of the TPTs, inasmuch the maximum value of the currents, M_x and M_y , reaches a maximum value at the CNPs. We have checked that this is a common feature for different values of the magnetic field.

VI. ACKNOWLEDGMENTS

The work was supported by the Projects FIS2014-59386-P, FIS2013-43201-P and TEC2014-52152-C3-2-R and the Junta de Andalucía projects 12.FQM.1861 and FQM-381.

-
- [1] Takeda K., Shiraishi K., Phys. Rev. B **50**, 14916 (1994).
 - [2] Guzmán-Verri G. G. and Lew YanVoon L. C., Phys. Rev. B **76**, 075131, (2007).
 - [3] Cahangirov S. ,Topsakal M.,Aktürk E., Sahin H. and Ciraci S., Phys. Rev. Lett. **102**, 236804 (2009).
 - [4] Grazianetti C., Cinquanta E., and Molle A., 2D Mater. **3**, 012001 (2016).
 - [5] Ezawa M., New J. Phys. **14**, 033003 (2013); M. Ezawa J. Phys. Soc. Jpn. **84**, 121003 (2015).
 - [6] Tahir M. and Schwingenschlögl U., Scientific Reports, **3**, 1075 (2013).
 - [7] Tao L. et al., Nature Nanotechnology **10** , 227 (2015).
 - [8] Yan J.-A., Dela Cruz M. A., Barraza-Lopez S. and Yang L., Appl. Phys. Lett., **106** (2015) 183107.
 - [9] Rivero P., Yan J.-A., García-Suárez V. M., Ferrer J. and Barraza-Lopez S., Phys. Rev. B, **90** (2014) 241408R.
 - [10] Tsai W.-F., Huang C.-Y., Chang T.-R. et al., Nat. Commun., **4** (2013) 1500.
 - [11] Kane C. L., and Mele E. J., Phys. Rev. Lett. **95**, 226801 (2005).
 - [12] Bernevig B. Andrei, Hughes Taylor L., and Zhang Shou-Cheng, Science **314**, 1757-1761 (2006).
 - [13] Qui X-L. and Zhang S-C., Physics Today **63**, 33 (2010).
 - [14] Romera E. and Calixto M., Europhys. Lett. **111**, 37006 (2015).
 - [15] Calixto M. and Romera E., J. Stat. Mech. P06029 (2015).
 - [16] Romera E. and Calixto M., J. Phys.: Condens. Matter **27**, 175003 (2015).
 - [17] Calixto M. and Romera E., Europhys. Lett. **109**, 40003 (2015).
 - [18] López A., Sun Z.Z., and Schliemann J., Phys. Rev. B **85**, 205428 (2012)
 - [19] Rempe G., Walther H., and Klein N., Phys. Rev. Lett. **58**, 353 (1987).
 - [20] Yeazell J.A., Mallalieu M., and Stroud C.R jr., Phys. Rev. Lett. **64**, 2007 (1990).
 - [21] Baumert T., Engel V., Röttgermann C., Strunz W.T., and Gerber G., Chem. Phys. Lett. **191**, 639 (1992).

- [22] Vrakking M.J.J., Villeneuve D.M., and Stolow A., *Phys. Rev. A* **54**, R37-R40 (1996).
- [23] Rudenko A., Ergler Th., Feuerstein B., Zrost K., Schröter C.D., Moshhammer R. , and J. Ullrich, *Chem. Phys.* **329**, 193 (2006).
- [24] Drummond N. D., Zólyomi V., and Fal'ko V. I., *Phys. Rev. B* **85**, 075423 (2012).
- [25] Stille L. , Tabert C. J., and Nicol E. J., *Phys. Rev. B* **86**, 195405 (2012); Tabert C.J. and E.J. Nicol, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 197402 (2013); Tabert C.J. and Nicol E.J., *Phys. Rev. B* **88**, 085434 (2013).
- [26] Liu, W. Feng C. C., and Yao Y., *Phys. Rev. Lett.* **107**, 076802 (2011).
- [27] Liu C. C., Jiang H., and Yao Y., *Phys. Rev. B* **84**, 195430 (2011).
- [28] van den Broek B. et al., *2D Materials* **1**, 021004 (2014).
- [29] Trivedi S., Srivastava A., and Kurchania R., *J. Comput. Theor. Nanosci.* **11**, 1-8 (2014).
- [30] Robinett R. W., *Phys. Rep.* **392**, 1 (2004).
- [31] Romera E. and de los Santos F., *Phys. Rev. B* **80**, 165416 (2009).
- [32] García T., Cordero N. A., and Romera E., *Phys. Rev. B* **89**, 075416 (2014).
- [33] Romera E., Roldán J. B., and de los Santos F., *Phys Lett. A* **378**, 2582 (2014).
- [34] Chuang H.J., et al., *Nano Lett.* **16**, 1896 (2016).
- [35] Munárriz J. et al., *Nanotechnology* **22**, 365201 (2011).

3.2. Fidelidad

La Fidelidad (o echo de Loschmidt) dependiente del tiempo se puede definir como una función de autocorrelación de espín y se ha utilizado de forma exitosa para cuantificar la decoherencia y localizar las transiciones de fase cuánticas [52, 53]. La Fidelidad viene dada por la expresión

$$M_L^{s\xi}(\Delta_z, \delta_z, t) = |\langle \Psi(\Delta'_z, t) | \Psi(\Delta_z, t) \rangle|^2 = \left| \sum_{n,m=0}^{\infty} c_m c_n e^{i(E_{m,\Delta'_z}^{s,\xi} - E_{n,\Delta_z}^{s,\xi})t/\hbar} \langle m | n \rangle_{s,\xi,\Delta'_z} \right|^2, \quad (3.2)$$

donde $\Delta'_z = \Delta_z + \delta_z$ siendo δ_z una pequeña variación respecto de Δ_z .

Utilizando la Fidelidad, hemos conseguido definir tres escalas temporales T_L^{ZB} , T_L^{CL} y T_L^R (llamadas, respectivamente, periodicidades de Loschmidt Zitterwebeung, clásica y revival) que han resultado útiles para localizar los puntos donde tienen lugar las transiciones de fase topológicas. En el mismo sentido, la amplitud de la Fidelidad (tanto dependiente como independiente del tiempo) ha resultado útil a la hora de caracterizar la TPT en siliceno.

Los resultados obtenidos han sido publicados en el artículo:

J. C. Bolívar, Nicolás A. Cordero, Á. Nagy and E. Romera, Fidelity as a marker of topological phase transitions in 2D Dirac materials, *International Journal of Quantum Chemistry*, **118** (17), e25674 (2018).

DOI: <https://doi.org/10.1002/qua.25674>

Fidelity as a marker of topological phase transitions in 2D Dirac materials

J. C. Bolívar

*Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear and
Instituto Carlos I de Física Teórica y Computacional,
Universidad de Granada, Fuentenueva s/n 18071 Granada, Spain*

N. A. Cordero

*Departamento de Física and International Research Centre in Critical Raw
Materials for Advanced Industrial Technologies (ICCRAM), Universidad de Burgos,
Burgos, Spain and Instituto Carlos I de Física Teórica y Computacional,
Universidad de Granada, Granada, Spain*

Á. Nagy

*Department of Theoretical Physics,
University of Debrecen, Debrecen, Hungary*

E. Romera

*Instituto Carlos I de Física Teórica y Computacional and Departamento de Física Atómica,
Molecular y Nuclear, Universidad de Granada,
Fuentenueva s/n 18071 Granada, Spain*

Abstract

Silicene, as other 2D buckled structures, is a gapped Dirac material with intrinsic spin-orbit coupling whose band structure can be controlled by applying a perpendicular electric field. It presents a topological phase transition from a topological insulator to a band insulator at the charge neutrality point. We present in this paper a characterization of this phase transition by using fidelity of Loschmidt echoes when a magnetic and two slightly different electric fields are applied by considering the time evolution of two kinds of wave packets, one with a single Gaussian profile and the other with a double Gaussian profile creating a cat state. We also show that Zitterbewegung, classical and revival Loschmidt periods diverge close to but not exactly at the charge neutrality point and explain this behaviour.

I. INTRODUCTION

Silicene is a two dimensional crystal of silicon, belonging to a group of 2D gapped Dirac materials analogous to graphene but with a relevant intrinsic spin-orbit coupling (as compared to graphene) and a buckled structure. It has been studied theoretically [1, 2] and experimentally [3–7]. Other gapped Dirac materials are germanene, stannene and Pb [8]. In the case of silicene, the low energy electronic properties can be described by a Dirac Hamiltonian with a Fermi velocity $v_F = 5 \times 10^5 \text{ m s}^{-1}$ and a value of the spin-orbit coupling $\Delta_{\text{so}} = 4.2 \text{ meV}$. It has a buckling length $l = 0.22 \text{ \AA}$ which allows to control the band structure by applying an electric field, $\mathcal{E}_z = \Delta_z/l$, perpendicular to the silicene monolayer generating a tunable band gap $|\Delta_{s,\xi}| = |(\Delta_z - s\xi\Delta_{\text{so}})/2|$ (s and ξ denote spin and valley, respectively). Silicene has a topological phase transition (TPT) [9] from a topological insulator (TI, $|\Delta_z| < \Delta_{\text{so}}$) to a band insulator (BI, $|\Delta_z| > \Delta_{\text{so}}$), at a charge neutrality point (CNP) $\Delta_z^{(0)} = s\xi\Delta_{\text{so}}$, with a gap cancellation between the perpendicular electric field and the spin-orbit coupling, thus exhibiting a semimetal behavior.

Topological phases are characterized by topological charges like Chern numbers. Theoretical information measures and uncertainty relations have been used to characterize TPTs [10–13]. Recently, we have studied the time evolution of electron wave packets in silicene under perpendicular magnetic and electric fields to characterize topological-band insulator transitions [14].

In this paper we want to use fidelity to characterize TPTs. Fidelity (also known as Loschmidt Echo), was introduced by Peres [15] and it has been used to understand the dynamics in few [16–18] and many-body [19–21] quantum systems. It has been relevant to quantify a very important problem in quantum physics, that is, the problem of the coherence and stability of the dynamics of many bodies subject to external perturbations [22]. Additionally, fidelity has been used to quantify corruption in the context of quantum information [23]. Recently, it has been used to study quantum phase transitions in a XXZ spin chain model in a random magnetic field [24] and in a spin-interacting XY model [25]. Additionally, we want to point out the seminal article [26], and other interesting works like [27, 28] or the revision about Loschmidt echoes and quantum phase transitions in [29].

The paper is organized as follows. In Section 2, we introduce the low energy Hamiltonian describing the electronic properties of silicene and similar 2D materials in perpendicular elec-

	Δ_{so} (meV)	l (Å)	v_{F} (10^5 m/s)
Si	4.2	0.22	4.2
Ge	11.8	0.34	8.8
Sn	36.0	0.42	9.7
Pb	207.3	0.44	–

TABLE I: Approximate values of model parameters Δ_{so} (spin-orbit coupling), l (interlattice distance) and v_{F} (Fermi velocity) for two-dimensional Si, Ge, Sn and Pb sheets. These data have been obtained from first-principles computations in [8] (Δ_{so} and l) and [30, 31] (v_{F}).

tric and magnetic fields. Section 3 contains a study of the relationship between topological phase transitions and fidelity. Our results for Loschmidt periodicities are given in Section 4 while a more detailed study of the time evolution of the echos is presented in Section 5. Finally, Section 6 contains our conclusions.

II. LOW ENERGY HAMILTONIAN

Let us consider a monolayer silicene film in external magnetic B and electric \mathcal{E}_z fields applied perpendicularly to the silicene plane. The low energy effective Hamiltonian in the vicinity of the Dirac point is given by [9]

$$H_s^\xi = v_{\text{F}}(\sigma_x p_x - \xi \sigma_y p_y) - \frac{1}{2} \xi s \Delta_{\text{so}} \sigma_z + \frac{1}{2} \Delta_z \sigma_z, \quad (1)$$

where ξ corresponds to the inequivalent corners K ($\xi = 1$) and K' ($\xi = -1$) of the first Brillouin zone, respectively, σ_j are the usual Pauli matrices, v_{F} is the Fermi velocity of the Dirac fermions (see Table I for theoretical estimations for Si as well as for other materials: Ge, Sn and Pb), spin up and down values are represented by $s = \pm 1$, respectively, and Δ_{so} is the band gap induced by intrinsic spin-orbit interaction, which provides a mass to the Dirac fermions. We are considering the application of a constant electric field \mathcal{E}_z which creates a potential difference $\Delta_z = l\mathcal{E}_z$ between sub-lattices. The value l appears in table I for different materials. The values of the spin-orbit energy gap induced by the intrinsic spin-orbit coupling has been theoretically estimated [8, 32–34] for different 2D Dirac materials that we show in Table I.

The eigenvalue problem can be easily solved. Using the Landau gauge, $\vec{A} = (0, Bx, 0)$, the corresponding eigenvalues and eigenvectors for the K and K' points are given by [9–13, 35]

$$E_{n,\Delta_z}^{s,\xi} = \begin{cases} \text{sgn}(n)\sqrt{|n|\hbar^2\omega^2 + \Delta_{s,\xi}^2}, & n \neq 0, \\ -\xi\Delta_{s,\xi}, & n = 0, \end{cases} \quad (2)$$

and

$$|n\rangle_{s,\xi} = \begin{pmatrix} -iA_{n,\Delta_z}^{s,\xi}||n| - \xi_+\rangle \\ B_{n,\Delta_z}^{s,\xi}||n| - \xi_-\rangle \end{pmatrix}, \quad (3)$$

where we denote by $\xi_{\pm} = (1 \pm \xi)/2$, the Landau level index $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, the cyclotron frequency $\omega = v_F\sqrt{2eB/\hbar}$, the lowest band gap $\Delta_{s,\xi} \equiv (\Delta_z - s\xi\Delta_{s0})/2$ and the constants $A_{n,\Delta_z}^{s,\xi}$ and $B_{n,\Delta_z}^{s,\xi}$ are given by [35]

$$A_{n,\Delta_z}^{s,\xi} = \begin{cases} \text{sgn}(n)\sqrt{\frac{|E_{n,\Delta_z}^{s,\xi}| + \text{sgn}(n)\Delta_{s,\xi}}{2|E_{n,\Delta_z}^{s,\xi}|}}, & n \neq 0, \\ \xi_-, & n = 0, \end{cases}$$

$$B_{n,\Delta_z}^{s,\xi} = \begin{cases} \sqrt{\frac{|E_{n,\Delta_z}^{s,\xi}| - \text{sgn}(n)\Delta_{s,\xi}}{2|E_{n,\Delta_z}^{s,\xi}|}}, & n \neq 0, \\ \xi_+, & n = 0, \end{cases} \quad (4)$$

The vector $|m\rangle$ with $m = 0, 1, 2, \dots$ denotes an orthonormal Fock state of the harmonic oscillator, and we will have $m = |n| \pm \xi_{\pm}$. Note that the case $m = -1$ always cancels due to the value of the coefficients $A_{n,\Delta_z}^{s,\xi}$ or $B_{n,\Delta_z}^{s,\xi}$ defined in (4).

III. FIDELITY AND TOPOLOGICAL PHASE TRANSITIONS

We are going to generalize the definition of fidelity given by [36] for two slightly different initial states in the following way. If we have a Hamiltonian H and consider a small perturbation that gives a perturbed Hamiltonian H' , with time evolution operators $U(t)$ and $U'(t)$, respectively and study the time evolution of some arbitrary but similar initial states $|\Psi_0\rangle$ and $|\Psi'_0\rangle$ with both Hamiltonians, we get

$$|\Psi(t)\rangle = U(t)|\Psi_0\rangle$$

$$|\Psi'(t)\rangle = U'(t)|\Psi'_0\rangle. \quad (5)$$

The *time-dependent fidelity amplitude* with respect to the unperturbed evolution, is defined as the overlap of the perturbed and unperturbed time-evolving states:

$$m(t) = \langle\Psi(t)|\Psi'(t)\rangle = \langle\Psi_0|U(-t)U'(t)|\Psi'_0\rangle. \quad (6)$$

Time-dependent fidelity is the square of its modulus

$$M(t) = |m(t)|^2 . \quad (7)$$

We will have $M(t) = 1$ if $H' = H$ and $|\Psi'_0\rangle = |\Psi_0\rangle$. It is clear that if the Hamiltonians and the initial states are very similar, i.e. the perturbation is small, we will have a fidelity close to one. Otherwise the fidelity value will be smaller than 1.

We can also define *time-independent fidelity* as

$$F = M(t = 0) . \quad (8)$$

If, instead of using states, we want to use densities, we can consider the DFT fidelity amplitude defined by [37]:

$$f(\rho, \sigma) = \int \rho^{1/2}(\mathbf{r})\sigma^{1/2}(\mathbf{r})d\mathbf{r} \quad (9)$$

where $\rho(\mathbf{r})$ and $\sigma(\mathbf{r})$ are two densities. We will have $f(\rho, \sigma) = 1$ if $\rho(\mathbf{r}) = \sigma(\mathbf{r})$ everywhere. The more the densities differ, the smaller the value of the fidelity amplitude.

In order to compute fidelity, we have to write first the Hamiltonian eigenstates given in Eq. (3) in position and momentum representations. We know that Fock (number) states $|n\rangle$ can be written in position representation as

$$\langle x|n\rangle = \frac{\omega^{1/4}}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{-\omega x^2/2} H_n(\sqrt{\omega}x) \quad (10)$$

where $H_n(x)$ are the Hermite polynomials of degree n . We will introduce the number-state density in position space as $\rho_n(x) = |\langle x|n\rangle|^2$, which are normalized according to $\int \rho_n(x)dx = 1$. Now, taking into account Eq. (3), the position density for the Hamiltonian eigenvectors is given by

$$\rho_{n,\Delta_z}^{s,\xi}(x) = (A_{n,\Delta_z}^{s,\xi})^2 |\langle x||n| - \xi_+\rangle|^2 + (B_{n,\Delta_z}^{s,\xi})^2 |\langle x||n| - \xi_-\rangle|^2. \quad (11)$$

We will study $f(\rho_{n,\Delta_z}^{s,\xi}, \rho_{n,\Delta'_z}^{s,\xi})$ that is, fidelity amplitude for the densities corresponding to electric field values Δ_z and $\Delta'_z = \Delta_z + \delta_z$, where $\delta_z \ll \Delta_z$.

As already stated, there is a prediction (see e.g. [32–34, 38]) that when the gap $|\Delta_{s,\xi}|$ vanishes at the CNP $\Delta_z^{(0)}$, silicene undergoes a phase transition from a topological insulator (TI, $|\Delta_z| < \Delta_{so}$) to a band insulator (BI, $|\Delta_z| > \Delta_{so}$). This topological phase transition entails an energy band inversion. Indeed, in Figure 1 we show the fidelity amplitude as a function of the external electric potential Δ_z for $B = 0.01$ T. One can see that there is a

band inversion for the $n = 0$ Landau level (either for spin up and down) at both valleys. The energies $E_0^{1,\xi}$ and $E_0^{-1,\xi}$ have the same sign in the BI phase and different sign in the TI phase, thus distinguishing both regimes.

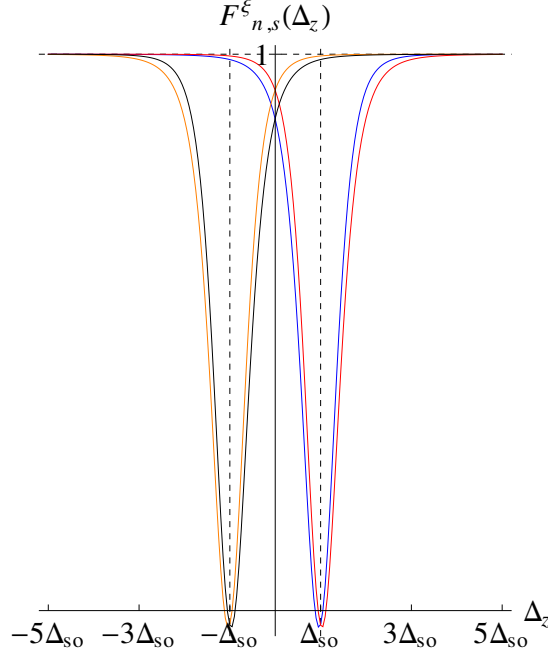


FIG. 1: $F_{n,s}(\Delta_z) \equiv f(\rho_{n,\Delta_z}^{s\xi}, \rho_{n,\Delta_z+\delta\Delta_z}^{s\xi})$ when $B = 0.01$ T and $\xi = 1$ for $n = 1, s = 1$ (blue); $n = -1, s = 1$ (red); $n = 1, s = -1$ (orange); and $n = -1, s = -1$ (black).

We are going to consider two types of Gaussian wave packets in this work. The first type is a single Gaussian packet centered on the n_0 -th level above the Fermi level:

$$|\Psi(\Delta_z, t)\rangle = |\psi(t)\rangle_{s,\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-iE_{n,\Delta_z}^{s,\xi} t/\hbar} |n\rangle_{s,\xi} \quad (12)$$

with

$$c_n = \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} e^{-(n-n_0)^2/(2\sigma^2)}, \quad (13)$$

where n_0 defines the center of the wave packet and σ its width.

The second type of wave packet is a cat state that consists of two Gaussians symmetrically distributed around the n_0 -th levels above and below the Fermi level:

$$|\Psi(\Delta_z, t)\rangle = |\psi(t)\rangle_{s,\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-iE_{n,\Delta_z}^{s,\xi} t/\hbar} |n\rangle_{s,\xi} +$$

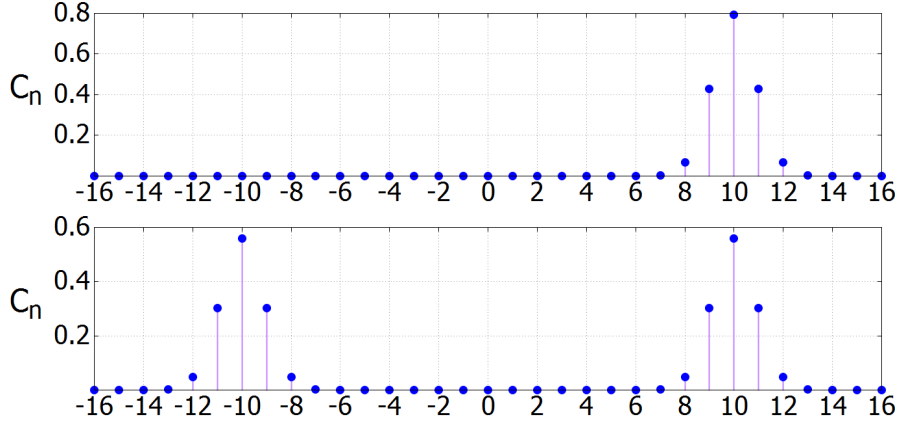


FIG. 2: Coefficients used for the two types of wave packets used. The upper panel shows the packet centered around $n_0 = 10$ (we will call it Type I) while the lower panel depicts the packet centered around $n_0 = 10$ and $n'_0 = -n_0 = -10$ (we will call it Type II). In both cases $\sigma = 0.9$.

$$+ \sum_{n=-\infty}^0 c'_n e^{-iE_{n,\Delta_z}^{s,\xi} t/\hbar} |n\rangle_{s,\xi} \quad (14)$$

with

$$c_n = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-(n-n_0)^2/(2\sigma^2)} \quad \text{and} \quad c'_n = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-(n+n_0)^2/(2\sigma^2)}. \quad (15)$$

Examples of coefficients for both types of wave packets –that we will call Type I and Type II, respectively– can be seen in Fig. 2.

Time-dependent fidelity can be written for a Type I packet as

$$M_L^{s,\xi}(\Delta_z, \delta_z, t) = |m_{s,\xi}(\Delta_z, \delta_z, t)|^2, \quad (16)$$

where

$$\begin{aligned} m_{s,\xi}(\Delta_z, \delta_z, t) &= \langle \Psi(\Delta'_z, t) | \Psi(\Delta_z, t) \rangle = \\ &= {}_{\Delta'_z} \langle \Psi_0 | e^{iH(\Delta'_z)t/\hbar} e^{-iH(\Delta_z)t/\hbar} | \Psi_0 \rangle_{\Delta_z} = \\ &= \sum_{n,m=0}^{\infty} c_m c_n e^{i(E_{m,\Delta'_z}^{s,\xi} - E_{n,\Delta_z}^{s,\xi})t/\hbar} {}_{s,\xi,\Delta'_z} \langle m | n \rangle_{s,\xi,\Delta_z}. \end{aligned} \quad (17)$$

Since we are only going to consider very small δ_z values, we can assume the variations in the energy levels due to the small change in the electric field are smaller than the difference between two consecutive levels and the orthogonality relations among states will approximately

hold, i.e. ${}_{s,\xi,\Delta'_z}\langle m|n\rangle_{s,\xi,\Delta_z} \approx {}_{s,\xi,\Delta_z}\langle m|n\rangle_{s,\xi,\Delta_z}$ with

$$\begin{aligned} {}_{s,\xi,\Delta'_z}\langle m|n\rangle_{s,\xi,\Delta_z} &= A_{m,\Delta'_z}^{s,\xi} A_{n,\Delta_z}^{s,\xi} \delta_{|m|-\xi_+,|n|-\xi_+} + B_{m,\Delta'_z}^{s,\xi} B_{n,\Delta_z}^{s,\xi} \delta_{|m|-\xi_-,|n|-\xi_-} = \\ &= A_{m,\Delta'_z}^{s,\xi} A_{n,\Delta_z}^{s,\xi} \delta_{|m|,|n|} + B_{m,\Delta'_z}^{s,\xi} B_{n,\Delta_z}^{s,\xi} \delta_{|m|,|n|}. \end{aligned} \quad (18)$$

Taking into account the Kronecker deltas in Eq. (18) the fidelity time evolution given in Eq. (17) is governed by the energy differences $E_{n,\Delta'_z}^{s,\xi} - E_{n,\Delta_z}^{s,\xi}$ for $m = n$. We are going to assume levels are so close to each other we can use the continuous approximation and perform a limited Taylor expansion for the energy around the n_0 level,

$$\begin{aligned} E_{n,\Delta'_z}^{s,\xi} - E_{n,\Delta_z}^{s,\xi} &\approx \left(E_{n_0,\Delta'_z}^{s,\xi} - E_{n_0,\Delta_z}^{s,\xi} \right) + \\ &+ \left(E_{n_0,\Delta'_z}^{s,\xi'} - E_{n_0,\Delta_z}^{s,\xi'} \right) (n - n_0) + \\ &+ \frac{1}{2} \left(E_{n_0,\Delta'_z}^{s,\xi''} - E_{n_0,\Delta_z}^{s,\xi''} \right) (n - n_0)^2, \end{aligned} \quad (19)$$

where primes in energies denote derivatives with respect to level numbers.

Therefore, the exponential in (17) contains three parts. The first one does not depend on n and leads to a global phase factor, while the other two ones give rise to periodic oscillations with two different periods: The first oscillation period is analogous to the one found when a localized wave packet is excited with an energy spectrum which is tightly spread around a large central value of the principal quantum number of the unperturbed Hamiltonian. Following correspondence principle arguments it has been associated with the classical period of motion of the unperturbed Hamiltonian [39]. Therefore, in our case it can be called classical Loschmidt period,

$$T_L^{\text{Cl}} = \frac{2\pi\hbar}{|E_{n_0,\Delta'_z}^{s,\xi'} - E_{n_0,\Delta_z}^{s,\xi'}|}. \quad (20)$$

The second oscillation period is responsible for the long-term spreading and reconstruction of the wave packet associated with the quantum revival time scale [39] and can be called revival Loschmidt period

$$T_L^{\text{R}} = \frac{2\pi\hbar}{|E_{n_0,\Delta'_z}^{s,\xi''} - E_{n_0,\Delta_z}^{s,\xi''}|}. \quad (21)$$

An analogous derivation can be made for the time evolution of the fidelity for a Type II wave packet, but in this case a new feature arises. Since we have both positive and negative values for n , the absolute values in the Kronecker deltas in Eq. (18) become relevant and the

time evolution is now governed by the energy differences $E_{n,\Delta'_z}^{s,\xi} - E_{m,\Delta_z}^{s,\xi}$ for $m = \pm n$. This means that the exponential in the equation analogous to (17) no longer contains a global phase factor but a third period of oscillation –similar to the one due to Zitterbewegung that appears for the unperturbed Hamiltonian [40]– that we can call Zitterbewegung Loschmidt period,

$$T_L^{\text{Zb}} = \frac{\pi\hbar}{|E_{n_0,\Delta'_z}^{s,\xi} - E_{n_0,\Delta_z}^{s,\xi}|}. \quad (22)$$

The overall situation for this Loschmidt periodicities is analogous to the case of quantum revivals in monolayer graphene quantum dots as well as monolayer and bilayer graphene rings [41, 42]. Classical and revival periodicities appear for both Type I and Type II packets while Zitterbewegung only appears for Type II packets.

For the sake of simplicity we are going to select one valley ($\xi = 1$) and one spin orientation ($s = 1$) to study these oscillations in the next sections. Analogous results can be obtained for other $\{s, \xi\}$ combinations.

IV. LOSCHMIDT PERIODICITIES

As we pointed out in the Introduction, it has been proposed that silicene undergoes a topological phase transition at the charge neutrality point $\Delta_z^{(0)} = s\xi\Delta_{\text{so}}$. One could expect the phase transition at this point to show as divergences in the three periodic oscillations considered. We present in Fig. 3 Zitterbewegung, classical and revival Loschmidt periods for three different δ_z values for a Type II wave packet (the last two are also valid for a Type I packet).

It is clear that the the three periodicities diverge near the charge neutrality point but not exactly at it. In fact there seems to be a dependence on the value of δ_z : The smaller δ_z the closer the divergence is to the CNP. There is an easy explanation for this feature. We have to take into account that in order to calculate the fidelity we are working with two slightly different energy spectra corresponding to two different electric field values Δ_z and $\Delta'_z = \Delta_z + \delta_z$. For instance, for Eq. (22) to diverge, we need $E_{n,\Delta'_z}^{s,\xi} = E_{m,\Delta_z}^{s,\xi}$ and using (2), this means $(\Delta'_{s,\xi})^2 = \Delta_{s,\xi}^2$, that leads to $|\Delta'_z - s\xi\Delta_{\text{so}}| = |\Delta_z - s\xi\Delta_{\text{so}}|$ or, equivalently, $|\Delta_z + \delta_z - \Delta_z^{(0)}| = |\Delta_z - \Delta_z^{(0)}|$. Disregarding the trivial solution $\delta_z = 0$, we get $\Delta_z + \delta_z - \Delta_z^{(0)} =$

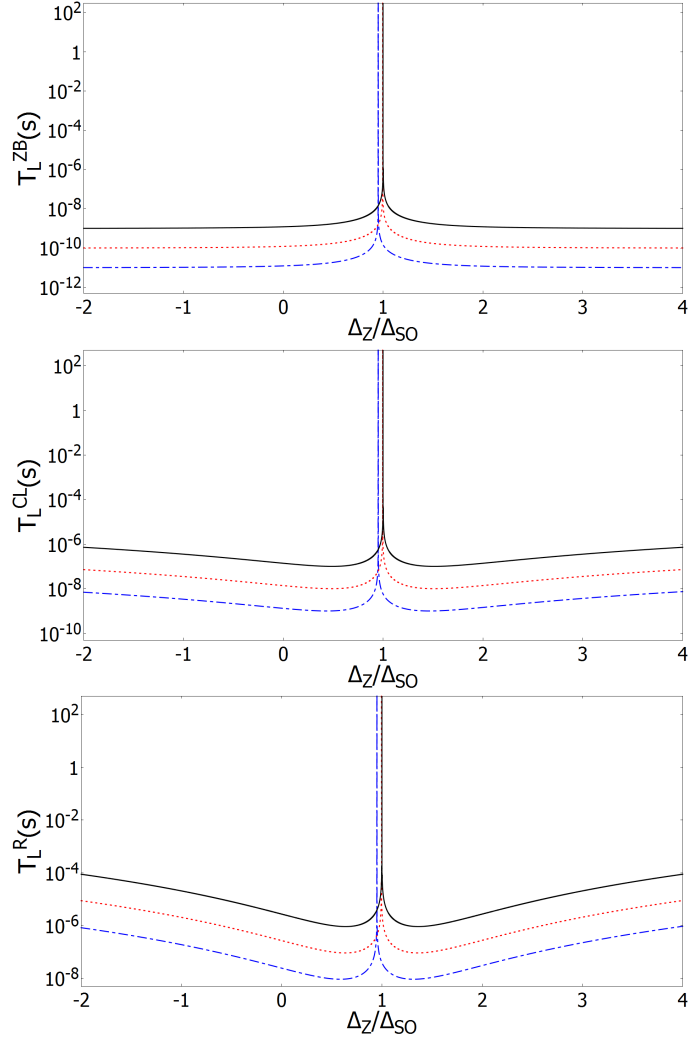


FIG. 3: Zitterbewegung (upper panel), classical (intermediate panel) and revival (lower panel) Loschmidt periods for different δ_z values for a Type II wave packet (the last two are also valid for a Type I packet). Solid black line for $\delta_z = 10^{-3}\Delta_{\text{so}}$, red dotted line for $\delta_z = 10^{-2}\Delta_{\text{so}}$ and blue dash-dotted line for $\delta_z = 10^{-1}\Delta_{\text{so}}$.

$-(\Delta_z - \Delta_z^{(0)})$ and, finally, the critical point is located at

$$\frac{\Delta_z}{\Delta_z^{(0)}} = 1 - \frac{1}{2} \frac{\delta_z}{\Delta_z^{(0)}}. \quad (23)$$

This result indicates that the divergences in the Loschmidt periods should appear close to the CNP (because $\delta_z \ll \Delta_z^{(0)}$) but not exactly at that point. This displacement with respect

to the exact critical point appears because in order to calculate Loschmidt fidelity we are using at the same time the unperturbed and the perturbed Hamiltonians corresponding to two slightly different electric fields and, therefore, slightly different charge neutrality points. The smaller the difference in the electric fields, the closer the divergence is to the CNP of the unperturbed Hamiltonian.

Taking into account the valley and spin selected ($\xi = s = 1$), $\Delta_z^{(0)} = s\xi\Delta_{\text{so}} = \Delta_{\text{so}}$ and Eq. (23) reads

$$\frac{\Delta_z}{\Delta_{\text{so}}} = 1 - \frac{1}{2} \frac{\delta_z}{\Delta_{\text{so}}} . \quad (24)$$

We present in Fig. 4 Zitterbewegung, classical and revival Loschmidt periods for the same three different δ_z values but only in the vicinity of the CNP. The three panels in the figure look similar but the time scales are different, $T_L^{\text{Zb}} \ll T_L^{\text{Cl}} \ll T_L^{\text{R}}$. It is clear that Eq. (24) is satisfied.

All Loschmidt periodicities shown in Fig. 4 seem to be symmetric with respect to the divergence. We will test in the next section if that is the case and analyze in greater detail the time evolution of the wave packets.

V. TIME-EVOLUTION OF THE ECHOES

We present in this section the time-dependent fidelity $M_L(t)$ defined in Eq. (16) and the time-independent fidelity calculated using Eq. (8), $F = M_L(t = 0)$, when $\delta_z = 10^{-2}\Delta_{\text{so}}$. Similar results are found for the $\delta_z = 10^{-1}\Delta_{\text{so}}$ and $\delta_z = 10^{-3}\Delta_{\text{so}}$ cases.

A. Type I wave packets

Let's analyze first the region below the critical point that, with the parameters chosen, is located at $\Delta_z = 0.995\Delta_{\text{so}}$. Fig. 5 shows the time evolution of the fidelity for the Type I packet described in the upper panel of Fig. 2 for three different values of the electric field ($\Delta_z = -2\Delta_{\text{so}}$, $\Delta_z = 0$ and $\Delta_z = 0.9\Delta_{\text{so}}$). In each case, the fidelity is shown as a function of time and as a function of classical and revival Loschmidt periods.

If we compare the upper left graph in each panel we can see that the classical Loschmidt period decreases when Δ_z increases from $-2\Delta_{\text{so}}$ to 0 but increases when it goes from 0 to

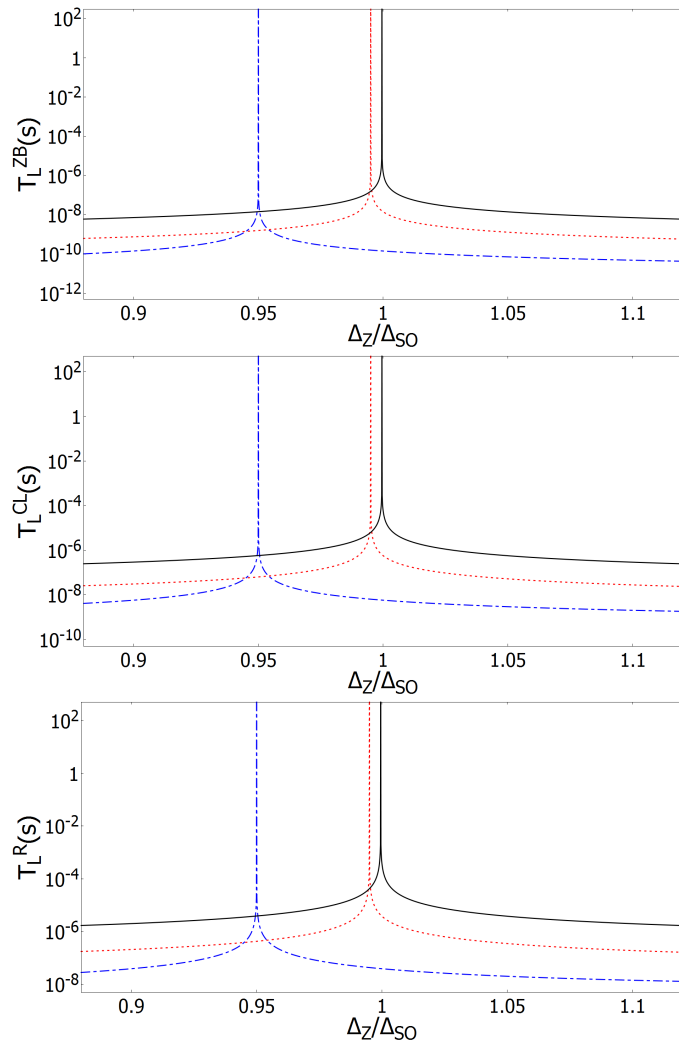


FIG. 4: The same as Fig. 3 but in the vicinity of the charge neutrality point.

$0.9\Delta_{\text{so}}$. In fact, if we look at the central panel in Fig. 3 we can see that T_L^{CI} decreases down to a minimum and then starts to increase when the system approaches the critical point.

If we now focus our attention on the upper right graph in each panel where $M_L(t)$ is depicted as a function of time but in T_L^{CI} units we notice that, obviously, there is one oscillation per unit in the t -axis but that while the amplitude of the oscillations seems to be constant in the upper panel, it is clearly modulated in the other two cases: It oscillates one and a half times in ten classical periods for $\Delta_z = 0.9\Delta_{\text{so}}$ but only describes half an oscillation when $\Delta_z = 0$. Nevertheless, if we use Loschmidt revival period as time unit we

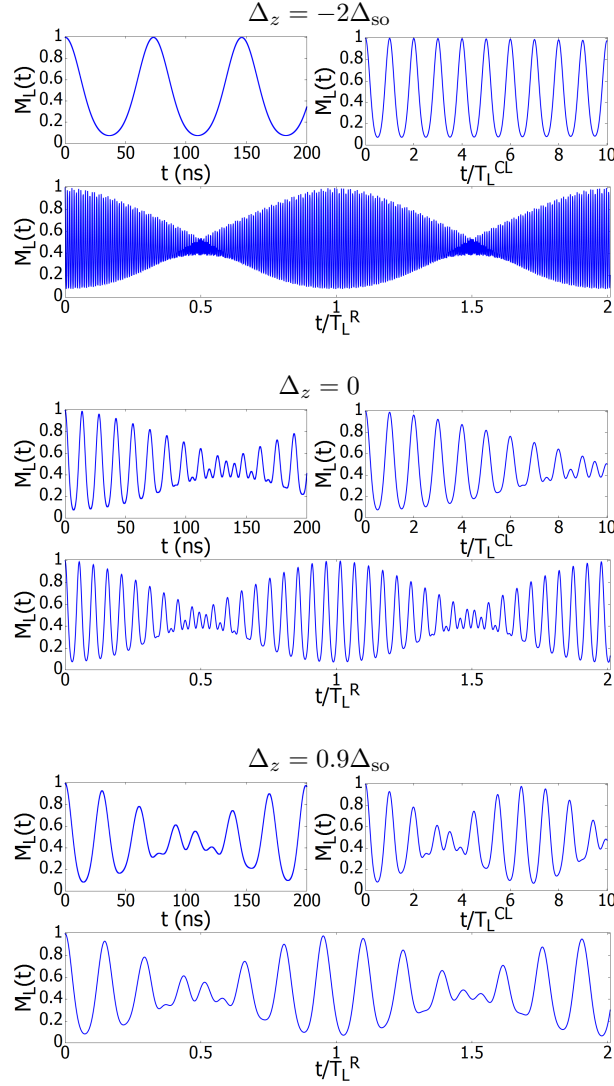


FIG. 5: Time-dependent fidelity for a Type I packet for three different values of Δ_z : $-2\Delta_{so}$ in the upper panel, 0 in the middle panel and $0.9\Delta_{so}$ in the lower one. In each case, this quantity is shown as a function of time and as a function of classical and revival Loschmidt periods.

get the graphs in the lower part of each panel. It is clear that there is always amplitude modulation but that when $\Delta_z = -2\Delta_{so}$ a great number of classical oscillations occur before a revival oscillation completes. In fact, the lower panel in Fig. 3 looks similar to the middle one but there is a big difference: the slope of the decreasing part is much bigger in absolute value (remember the logarithmic scale).

Let's move now to the region above the critical point. To test if classical and revival Loschmidt periods are symmetric with respect to this point as Fig. 3 suggests we have calculated the $\Delta_z = 3.99\Delta_{\text{so}}$, $\Delta_z = 1.99\Delta_{\text{so}}$ and $\Delta_z = 1.09\Delta_{\text{so}}$ cases that are the symmetrical ones to those presented in Fig. 5. The results are exactly the same as those of their counterparts and we don't show them. In fact, we have studied 9 different pairs of symmetrical points, both close to and far from the critical point, and in all cases there is perfect agreement. It is then clear that both classical and revival Loschmidt periods are symmetric with respect to the critical point as the middle and lower panels in Fig. 3 suggest.

In order to analyze in greater detail the amplitude of the oscillations in the fidelity we have calculated the maximum amplitude of the time-dependent fidelity,

$$(A_{M_L})_{\text{MAX}} = \max_{t \in [0, T_L^{\text{R}}]} M_L(t). \quad (25)$$

The left panel in Fig. 6 represents this quantity as a function of the electric field. The maximum amplitude slightly decreases close to the critical point and it is symmetric with respect to it.

We have also calculated the time-independent fidelity, F and plotted it in the right panel in Fig. 6. The result is the same, indicating that the maximum in fidelity occurs at $t = 0$.

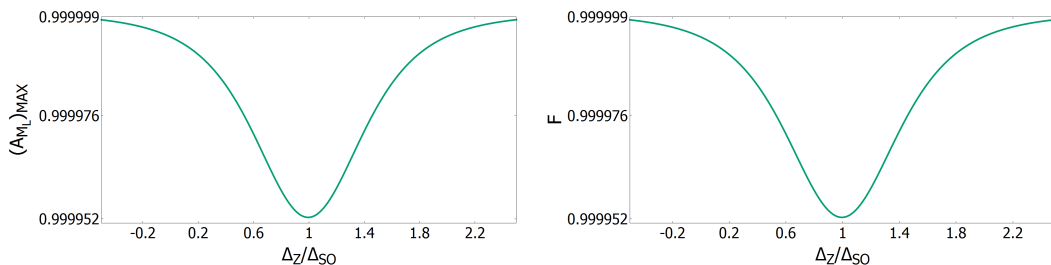


FIG. 6: Maximum amplitude of the time-dependent fidelity (left panel) and time-independent fidelity (right panel) for a Type I packet with $\delta_z = 10^{-2}\Delta_{\text{so}}$.

B. Type II wave packets

Cat states give rise to a third periodicity due to Zitterbewegung with a shorter period than the classical one and this fact introduces some differences with respect to Type I packets.

Let's start again with the region below the critical point. Fig. 7 shows the time evolution of the fidelity for the Type II packet described in the lower panel of Fig. 2 for three different values of the electric field ($\Delta_z = -2\Delta_{so}$, $\Delta_z = 0$ and $\Delta_z = 0.9\Delta_{so}$). In each case, the fidelity is shown as a function of time and as a function of Zitterbewegung, classical and revival Loschmidt periods.

If we compare the upper left graph in each panel we can see that the Zitterbewegung Loschmidt period increases as Δ_z increases from $-2\Delta_{so}$ to $0.9\Delta_{so}$. If we look at the upper panel in Fig. 3 we can see that T_L^{Zb} increases monotonically up to the critical point.

If we now move to the upper right graph in each panel where $M_L(t)$ is depicted as a function of time but in T_L^{Zb} units we see something similar to what happened when Type I results were plotted using T_L^{Cl} as time unit but the decay in the amplitude is much slower. More oscillations are needed for the amplitude modulation to show.

If we use Loschmidt revival period as time unit we get the graphs in the lower left part of each panel. The modulation is now more clear but Zitterbewegung is so fast with this time scale that individual oscillations are no longer visible and become a solid area. This is also the case when T_L^R is used as time unit (lower right graph of each panel). Nevertheless, Zitterbewegung, in spite of introducing a new oscillation that exhibits a different behavior with electric field than classical or revival oscillations (compare the upper panel in Fig. 3 with the other two ones), doesn't perturbate classical and revival Loschmidt periods because it has a completely different time scale.

Focusing now on the region above the critical point, we have performed the same test as we did for Type I packet and the result holds. Not only classical and revival Loschmidt periods are symmetric with respect to the critical point but Zitterbewegung Loschmidt period also exhibits the same symmetry.

We have also calculated the maximum amplitude of the time-dependent fidelity defined in (25). The left panel in Fig. 8 represents this quantity as a function of the electric field. The maximum amplitude slightly decreases in the vicinity of the critical point but increases close to it and presents the absolute maximum at this critical point. This is different to what happened for Type I packets but the symmetry with respect to the critical point is preserved.

We have calculated the time-independent fidelity defined in (8) too and plotted it in the right panel in Fig. 8. The result doesn't coincide with that for $(A_{ML})_{MAX}$ but with the one

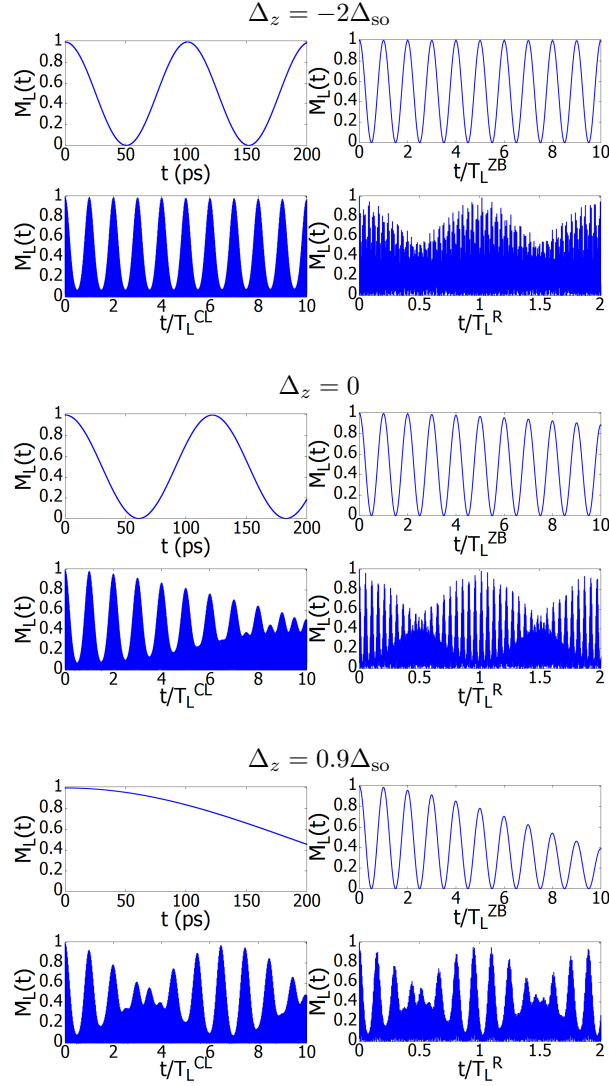


FIG. 7: Time-dependent fidelity for a Type II packet for three different values of Δ_z : $-2\Delta_{so}$ in the top panel, 0 in the central panel and $0.9\Delta_{so}$ in the bottom one. In each case, this quantity is shown as a function of time and as a function of Zitterbewegung, classical and revival Loschmidt periods.

for F in Type I packets. This difference indicates that the maximum in fidelity doesn't appear at $t = 0$ for cat states. Zitterbewegung can't affect F because this quantity only has to do with the initial overlap of the wave functions corresponding to the slightly different electric fields. But it changes $(A_{M_L})_{MAX}$ as the left panels in Figs. 6 and 8 clearly show.

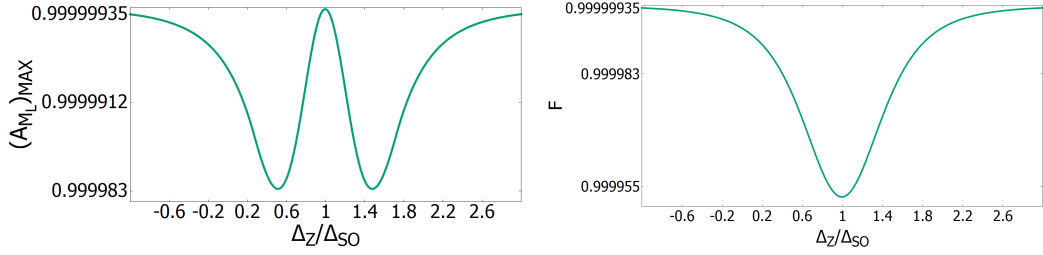


FIG. 8: Maximum amplitude of the time-dependent fidelity (left panel) and time-independent fidelity (right panel) for a Type II packet with $\delta_z = 10^{-2}\Delta_{SO}$.

VI. CONCLUSIONS

We have studied Zitterbewegung, classical and revival periods for silicene as a function of electric field intensity when the electric field is changed by a very small amount. We have used two different kinds of wave packets. Type I packet is a simple Gaussian while Type II is a double Gaussian cat state. We have shown that all three Loschmidt periods diverge close to the charge neutrality point. The offset with respect to this point is determined by the amount the electric field is changed.

We have also proven that time-independent as well as time-dependent fidelities can be used as markers of topological phase transitions in silicene (and other 2D gapped materials) and that time-independent fidelity is equal to the maximum of the time-dependent one for Type I packets but not for Type II packets.

Acknowledgments

This research was supported by the Junta de Andalucía projects FQM.1861 and FQM-381, the EU-funded Hungarian grant EFOP-3.6.2-16-2017-00005 and the National Research, Development and Innovation Fund of Hungary, financed under 123988 funding scheme.

Bibliography

-
- [1] K. Takeda and K. Shiraishi, Phys. Rev. B **50**, 14916 (1994).
- [2] G. G. Guzman-Verri and L. Lew Yan, Phys. Rev. B **76**, 075131 (2007).
- [3] P. Vogt et al., Phys. Rev. Lett. **108**, 155501 (2012).
- [4] B. Augray et al., App. Phys. Lett. **96**, 183102 (2010).
- [5] B. Lalmi et al., App. Phys. Letters **97**, 223109 (2010).
- [6] A. Feurence et al., Phys. Rev. Lett. **108**, 245501 (2012).
- [7] P. E. Padova et al., App. Phys. Lett. **96**, 261905 (2010).
- [8] W-F. Tsai et al., Nat. Commun. **4**, 1500 (2013).
- [9] M. Tahir and U. Schwingenschlögl, Scientific Reports, **3**, 1075 (2013).
- [10] E. Romera and M. Calixto, EPL, **111**, 37006 (2015).
- [11] M. Calixto and E. Romera, Journal of Statistical Mechanics, P06029 (2015).
- [12] E. Romera and M. Calixto, Journal of Physics: Condensed Matter, **27**, 175003 (2015).
- [13] M. Calixto and E. Romera, EPL, **109**, 40003 (2015).
- [14] E. Romera et al., EPL, **115**, 20008 (2016).
- [15] A. Peres, Phys. Rev. A, **34**, 1610 (1984).
- [16] P. Jacquod, I. Adagideli and C. W. J. Beenakker, Phys. Rev. Lett. **89**, 154103 (2002).
- [17] T. Prosen, T. H. Seligman and M. Znidaric, Prog. Theor. Phys. Suppl. **150**, 200 (2003).
- [18] M. Gutiérrez and A. Goussev, Phys. Rev. E **79**, 046211 (2009).
- [19] F. M. Cucchietti, H. M. Pastawski and R. A. Jalabert, Phys. Rev. B **70**, 035311 (2004).
- [20] E. J. Torres-Herrera and L. F. Santos, Phys. Rev. E **89**, 062110 (2004).
- [21] W. W. Ho and D. A. Abanin, Phys. Rev. B **95**, 094302 (2017).
- [22] T. Gorin et al., Phys. Rep. **435**, 33 (2006).
- [23] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum computation and quantum information* (Cambridge University Press, Cambridge) 2000.
- [24] M. Serbyn and Dmitry A. Abanin, Phys. Rev. B **96**, 014202 (2017).
- [25] R. Jafari and H. Johannesson, Phys. Rev. Lett. **118**, 015701 (2017).
- [26] H. T. Quan, Z. Song, X. F. Liu, P. Zanardi, and C. P. Sun, Phys. Rev. Lett. **96**, 140604

- (2006).
- [27] Zi-Gang Yuan, Ping Zhang, and Shu-Shen Li, *Phys. Rev. A* **75**, 012102 (2007).
 - [28] J. Häppölä, G. Halász, and A. Hamma, *Phys. Rev. A* **85**, 032114 (2012).
 - [29] R. Jafari and Henrik Johannesson, *Phys. Rev. B* **96**, 224302 (2017).
 - [30] S. Trivedi, A. Srivastava and R. Kurchania, *J. Comput. Theor. Nanosci.* **11**, 1-8 (2014).
 - [31] B. van den Broek et al. *2D Materials* **1**, 021004 (2014).
 - [32] N. D. Drummond, V. Zólyomi, and V. I. Fal'ko, *Phys. Rev. B* **85**, 075423 (2012).
 - [33] C. C. Liu, W. Feng and Y. Yao, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 076802 (2011).
 - [34] C. C. Liu, H. Jiang and Y. Yao, *Phys. Rev. B* **84**, 195430 (2011).
 - [35] L. Stille, C. J. Tabert and E. J. Nicol, *Phys. Rev. B* **86**, 195405 (2012); C.J. Tabert and E.J. Nicol, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 197402 (2013); C.J. Tabert and E.J. Nicol, *Phys. Rev. B* **88**, 085434 (2013).
 - [36] T. Gorina et al., *Physics Reports* **435**, 33 (2006).
 - [37] Gu Shi-Jian, *Chin. Phys. Lett.*, **26**, 026401 (2009).
 - [38] M. Ezawa, *New Journal of Physics* **14**, 033003 (2012).
 - [39] R.W. Robinett, *Phys. Rep.*, **392**, 1 (2004).
 - [40] E. Romera and F. de los Santos, *Phys. Rev. B*, **80**, 165416 (2009).
 - [41] T. García et al., *J. Phys.: Condens. Matter*, **25**, 235301 (2013).
 - [42] T. García, N. A. Cordero and E. Romera, *Phys. Rev. B*, **89**, 075416 (2014).

Capítulo 4

Caracterización de transiciones de fase topológicas mediante medidas de información

En este capítulo se han utilizado diversas medidas de teoría de la información para caracterizar las transiciones de fase topológicas que tienen lugar en los materiales pertenecientes a la familia del grafeno. Entre estas medidas se encuentran la entropía de Rényi relativa, la información de Fisher y medidas de complejidad.

4.1. Medidas de complejidad

La complejidad de un sistema se define a partir de la entropía relativa de Rényi de orden α , la cual viene dada por [54]

$$R_{f,g}^{\alpha} = \frac{1}{\alpha - 1} \log \int \frac{(f(x))^{\alpha}}{(g(x))^{\alpha-1}} dx \quad 0 < \alpha < \infty, \quad (4.1)$$

siendo α y β parámetros, mientras que $f(x)$ y $g(x)$ son distribuciones de probabilidad normalizadas. Con ella se define la complejidad como [55]

$$C_{f,g}^{(\alpha,\beta)} = e^{R_{f,g}^{(\alpha)} - R_{f,g}^{(\beta)}} \quad 0 < \alpha, \beta < \infty. \quad (4.2)$$

Las medidas de complejidad han resultado ser útiles en el estudio de varios sistemas físicos (ver [56, 57], por ejemplo). Nosotros hemos conseguido utilizar la entropía relativa de Rényi para caracterizar con éxito las transiciones de fase topológicas en los materiales de Dirac 2D. Adicionalmente, nos hemos valido de medidas de complejidad para definir un nuevo número cuántico, similar al número de Chern, que nos permite detectar el estado de aislante topológico en el que se

encuentra nuestro sistema.

Los resultados obtenidos se han publicado en el siguiente artículo:

J. C. Bolívar and E. Romera, Rényi entropies and topological quantum numbers in 2D gapped Dirac materials, *Physics Letters A*, **381**, 1753-1756 (2017).

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2017.03.037>

Complexity measures and topological quantum numbers in 2D gapped Dirac materials

J. C. Bolívar

Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear and Instituto Carlos I de Física Teórica y Computacional, Universidad de Granada, Fuentenueva s/n 18071 Granada, Spain

E-mail: jcbolivar@ugr.es

E. Romera

Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear and Instituto Carlos I de Física Teórica y Computacional, Universidad de Granada, Fuentenueva s/n 18071 Granada, Spain

E-mail: eromera@ugr.es

9 January 2017

Abstract. New topological quantum numbers are introduced by analyzing complexity measures and relative Rényi entropies in silicene in the presence of perpendicular electric and magnetic fields. These topological quantum numbers characterize the topological insulator and band insulator phases in silicene. In addition, we have found that, these information measures reach extremum values at the charge neutrality points. These results are valid for other 2D gapped Dirac materials analogous to silicene with a buckled honeycomb structure and a significant spin-orbit coupling.

PACS numbers: 03.65.Vf, 03.65.Pm,

1. Introduction

Silicene, a 2D honeycomb-like lattice of silicon with a buckled structure and a significant intrinsic spin-orbit coupling is a material, which can be described by a Dirac Hamiltonian. In this material there is a topological phase transition [1] from a topological insulator (TI) phase to a trivial band insulator (BI) phase, at a charge neutrality point (CNP). Silicene has several advantages in comparison with graphene: besides the stronger intrinsic spin-orbit coupling (useful for a better realization of quantum spin Hall effect in some cases), it has a better tunability of the band gap (useful for effective field transistors working at room temperature) and an easier valley polarization (for applications in valleytronic) [2]. There are theoretical and experimental progress in the study of silicene (see, for example, the review [3]). Theoretically, it has been verified that silicene have

Complexity measures and topological quantum numbers in 2D gapped Dirac materials 2

a stable 2D honeycomb buckled structure [4, 5, 6] with an estimated Fermi velocity $v_F = 10^6 \text{ms}^{-1}$ and with an equilibrium buckling of $l = 0.44 \text{\AA}$ which allows to control the band structure by applying a perpendicular electric field to the silicene layer. In fact the gap decreases and increases linearly, reaching the zero value for a critical value of the electric field (for this critical value spins are perfectly polarized up or down at the two inequivalent corners of the Brillouin zone, K and K' , respectively [7]). Experimentally, we can stress that it has been obtained epitaxially growing silicene on metallic substrates and it has been observed asilicene field-effect transistors operating at room temperature [3, 8]. There are other gapped Dirac materials with exceptional properties as germanene (Ge), tinene (Sn) or indiene (In) [9] having a structure analogous to that of silicene.

2D topological insulators have been theoretically predicted by Kane and Melle [10] using a model with a 2D material isostructural with graphene and with a stronger spin-orbit interaction. They were firstly observed experimentally in mercury telluride quantum wells [11] and then in other materials (see [12] and references therein). A topological insulator has an energy gap but with gapless edge or surface states that are topologically protected, in fact it is considered a singular matter state. A TI-BI transition is characterized by a band inversion with a level crossing at some critical value of a control parameter (electric field, quantum well thickness, etc). Recently theoretic information measures and some properties of the time evolution of electron wave packets have been used to characterize topological phase transitions in 2D gapped Dirac materials [13, 14, 15, 16, 17]. In particular, it has been shown that the inverse participation ratio (IPR) is an alternative measure of a topological insulator phase transition [14]. The IPR measures the delocalization of a state $|\psi\rangle$ over a basis $\{|i\rangle\}$ in terms of the probability p_i of finding the state $|\psi\rangle$ over the element $|i\rangle$ as $I = \sum p_i^2$.

In this paper we propose the relative Rényi entropy and a complexity measure to define topological quantum numbers and characterize the topological phases TI and BI in silicene (and other 2D analogous gapped Dirac Materials) in external magnetic and electric fields. The paper is organized as follows. In the next section we have introduced the model for the description of silicene, in section 3 we introduce the new topological quantum numbers doing a numerical analysis in the silicene model. Finally, our conclusions are presented in the final section.

2. Low energy Hamiltonian

Let us consider the effective Hamiltonian for a monolayer silicene in the vicinity of the Dirac points in external electric and magnetic fields, \mathcal{E}_z and B which are perpendicular to the silicene sheet [18, 19]:

$$H_s^\xi = v_F(\xi\sigma_x(p_x - eBy) - \sigma_y p_y) - \frac{1}{2}\xi s\Delta_{\text{so}}\sigma_z + \frac{1}{2}\Delta_z\sigma_z, \quad (1)$$

where $\xi = 1$ or $\xi = -1$ corresponds to the two inequivalent points K and K' , respectively, σ_j are the Pauli matrices, $s = \pm 1$ is the spin, v_F is the Fermi velocity of the Dirac fermions, Δ_{so} is the spin-orbit interaction, which provides an effective mass

Complexity measures and topological quantum numbers in 2D gapped Dirac materials 3

	Δ_{so} (meV)	l (Å)	v_F (10^5m/s)
Si	4.2	0.44	4.2
Ge	11.8	0.68	8.8
Sn	36.0	0.84	9.7

Table 1. Parameters Δ_{so} (spin-orbit coupling), l [9] and v_F (Fermi velocity) [20, 21] for monolayer Si (silicene), Ge (germanene) and Sn (tinene).

to the Dirac fermions, $\Delta_z = l\mathcal{E}_z$ the gap associated to the constant electric field \mathcal{E}_z (the electric field provides a tunable gap that produce a potential difference between both sub-lattices) and where we have taken into account the standard minimal coupling $\vec{p} \rightarrow \vec{p} + e\vec{A}$ with the Landau gauge vector potential $\vec{A} = (-By, 0, 0)$.

This is the effective Hamiltonian for other 2D Dirac materials (for example tinene or germanene) taking into account the different values of the interlattice distance, l , the intrinsic spin-orbit coupling, and the Fermi velocity. In Table 1 are the parameters (theoretically calculated in [18, 22, 23, 9]). We will do the study in silicene and all the results that we have obtained in this paper can be applied to the other 2D Dirac materials. These 2D Dirac materials suffers a topological phase transitions from the known as TI phase, for $|\Delta_z| < \Delta_{\text{so}}$, to the called BI phase, for $|\Delta_z| > \Delta_{\text{so}}$, when the value of the effective gap $|\Delta_{s\xi}|$ (with $\Delta_{s\xi} \equiv (\Delta_z - s\xi\Delta_{\text{so}})/2$, the lowest band gap) goes to zero at the charge neutrality points [18, 22, 23, 7].

The solution of the eigenvalue problem for the Hamiltonian (1) can be obtained analytically by [1, 19, 13, 14, 15, 16, 17]

$$E_n^{s\xi} = \begin{cases} \text{sgn}(n)\sqrt{|n|\hbar^2\omega^2 + \Delta_{s\xi}^2}, & n \neq 0, \\ -\xi\Delta_{s\xi}, & n = 0, \end{cases} \quad (2)$$

and

$$|n\rangle_{s\xi} = \begin{pmatrix} -iA_n^{s\xi}||n| - \xi_+\rangle \\ B_n^{s\xi}||n| - \xi_-\rangle \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Where, $\xi_{\pm} = (1 \pm \xi)/2$, $||n|\rangle$ are the orthonormal eigenstate of the harmonic oscillator with $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, $\omega = v_F\sqrt{2eB/\hbar}$ is the cyclotron frequency, and the constants $A_n^{s\xi}$ and $B_n^{s\xi}$ are given by [19]

$$A_n^{s\xi} = \begin{cases} \text{sgn}(n)\sqrt{\frac{|E_n^{s\xi}| + \text{sgn}(n)\Delta_{s\xi}}{2|E_n^{s\xi}|}}, & n \neq 0, \\ \xi_-, & n = 0, \end{cases} \quad (4)$$

$$B_n^{s\xi} = \begin{cases} \sqrt{\frac{|E_n^{s\xi}| - \text{sgn}(n)\Delta_{s\xi}}{2|E_n^{s\xi}|}}, & n \neq 0, \\ \xi_+, & n = 0. \end{cases}$$

We will used the position representation of the Fock (number) states $|n\rangle$, which is given by

$$\langle x|n\rangle = \frac{\omega^{1/4}}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{-\omega x^2/2} H_n(\sqrt{\omega}x) \quad (5)$$

Complexity measures and topological quantum numbers in 2D gapped Dirac materials 4

here, $H_n(x)$ are the Hermite polynomials of degree n . Let us introduce the position density

$$\rho_n(x) = |\langle x|n\rangle|^2 \quad (6)$$

(with $\int \rho_n(x)dx = 1$) and the position density for the eigenvectors (3)

$$\rho_n^{s\xi}(x) = (A_n^{s\xi})^2 |\langle x||n| - \xi_+\rangle_{s\xi}|^2 + (B_n^{s\xi})^2 |\langle x||n| - \xi_-\rangle_{s\xi}|^2. \quad (7)$$

3. Topological quantum numbers

3.1. Relative Rényi entropy

Let us consider two nonnegative distribution functions $f(\mathbf{r})$ and $g(\mathbf{r})$ normalized to 1. We can define the relative Rényi entropy of order α as [24, 25]

$$R_{f,g}^{(\alpha)} = \frac{1}{\alpha - 1} \ln \int \frac{f^\alpha(\mathbf{r})}{g^{\alpha-1}(\mathbf{r})} d\mathbf{r} \quad (8)$$

provided that the integral exists and $\alpha > 0$. The relative Rényi entropy is an increasing function of the parameter α [26] and in the limit $\alpha = 1$ it gives us the so-called Kullback-Leibler entropy [27]. Both entropies provide a distance between the functions f and g , although they are not true metrics. In fact when $f = g$, $R_{f,g}^{(\alpha)} = 1$ and $R_{f,g}^{(\alpha)} > 1$ in any other case (the more different f and g are, the larger $R_{f,g}^{(\alpha)}$). The Relative Rényi entropy gives a local comparison of the distribution functions.

If we take the function $f = \rho_n^{s\xi}$ and $g = \rho_0^{s\xi} = \rho_0$, we can define a combined relative Rényi entropy in terms of the sum of the relative Rényi entropy for electrons and holes:

$$\hat{R}_{\rho_n^{s\xi}, \rho_0}^{(\alpha)} = R_{\rho_n^{s\xi}, \rho_0}^{(\alpha)} + R_{\rho_{-n}^{s\xi}, \rho_0}^{(\alpha)} \quad (9)$$

Now we plot the combined relative Rényi entropy (Eq. 9) for silicene in terms of the external electric potential Δ_z for different values of the parameters. In Fig. 1 we have shown the results for $\alpha = 2.5$, an external perpendicular magnetic field $B = 0.01\text{T}$, the Landau levels $n = 2, 3, 4$ and 5 and for spin up (magenta lines) and down (green lines) Dirac fermions, in the valley $\xi = 1$. The curves have a maximum value at the CNP $\Delta_z = \Delta_{SO}$ ($\Delta_z = -\Delta_{SO}$) for the spin up (down) case. Moreover if we analyze the slope of the different curves we realize that for the BI phase the slopes of the spin up and down curves have the same sign, and for the TI phase they have different signs, so we can define a topological quantum number (like the Chern number) to identify the different phases in terms of the combined relative Rényi entropies (9) as:

$$C_1(\Delta_z) = \text{sgn} \left(\frac{\partial}{\partial \Delta_z} \left(\hat{R}_{\rho_n^{s\xi}, \rho_0}^{(\alpha)} \right) \frac{\partial}{\partial \Delta_z} \left(\hat{R}_{\rho_{-n}^{-s\xi}, \rho_0}^{(\alpha)} \right) \right) \quad (10)$$

which can be seen as the topological charge

$$C_1(\Delta_z) = \begin{cases} 1, & |\Delta_z| > \Delta_{SO} \quad \text{BI} \\ -1, & |\Delta_z| < \Delta_{SO} \quad \text{TI} \end{cases} \quad (11)$$

We have checked that the $C_1(\Delta_z)$'s has the same property when we have changed the α , B and ξ values in (9).

Complexity measures and topological quantum numbers in 2D gapped Dirac materials 5

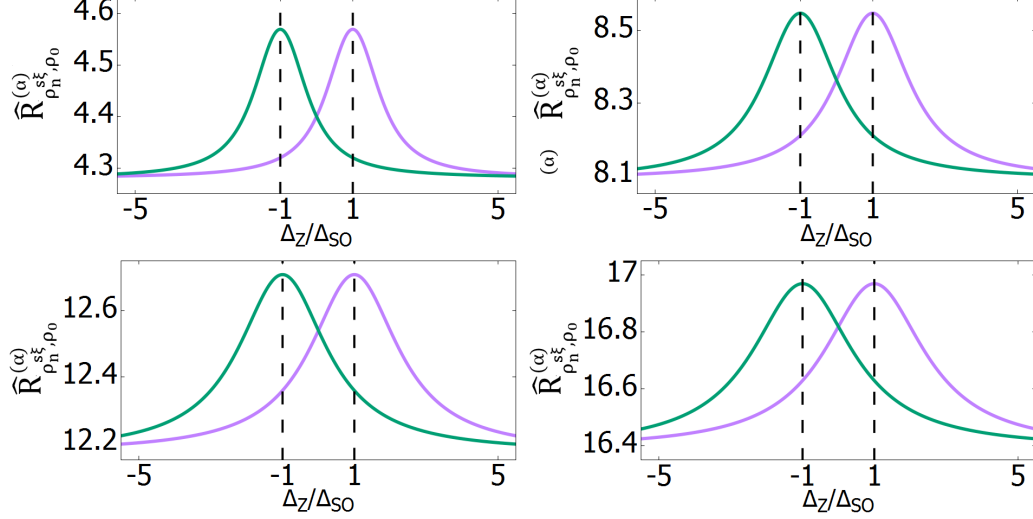


Figure 1. Combined Relative Rényi entropy $\hat{R}_{\rho_n, \rho_0}^{(\alpha)}$ of electron and holes in position space at valley $\xi = 1$ for $\alpha = 2.5$ as a function of the electric potential Δ_z for the Landau levels $n = 2$ (left top), 3 (right top), 4 (left bottom) and 5 (right bottom) for $B = 0.01$ T. Magenta lines for $s = +1$ and green lines for $s = -1$. The vertical black dotted grid lines indicate the charge neutrality points.

3.2. Relative complexity measure

The relative complexity measure is defined in terms of two relative Rényi entropies as [26]:

$$C_{f,g}^{\alpha,\beta} = e^{R_{f,g}^{(\alpha)} - R_{f,g}^{(\beta)}}, \quad 0 < \alpha, \beta < \infty. \quad (12)$$

$C_{f,g}^{\alpha,\beta}$ verifies some desirable properties associated with a complexity measure [28, 29] (the properties of inversion symmetry, monotonicity, invariance under translations, invariance under rescaling transformations, invariance under replication and near-continuity, see [26] for a detailed analysis of them). The relative complexity measure also gives a local comparison of the distribution functions [26] and has been revealed as a good tool to quantify quantum phase transitions in the Dicke and Vibron models [26, 30].

In a similar way to the previous case, we introduce a combined complexity measure for electrons and holes in terms of the combined Rényi entropy (Eq. 9) as

$$\hat{C}_{\rho_n, \rho_0}^{(\alpha,\beta)} = \exp[\hat{R}_{\rho_n, \rho_0}^{(\alpha)} - \hat{R}_{\rho_n, \rho_0}^{(\beta)}] = C_{\rho_n, \rho_0}^{(\alpha,\beta)} C_{\rho_{-n}, \rho_0}^{(\alpha,\beta)}. \quad (13)$$

In Fig. 2 we compute the combined relative complexity measure (Eq. 13) for silicene, for $(\alpha, \beta) = (2.5, 3)$, as a function of the external electric potential Δ_z for a magnetic field $B = 0.01$ T, the Landau levels $n = 2, 3, 4$ and 5, for the spin up (magenta lines) and down (green lines) Dirac fermions and in the valley $\xi = 1$. Now, the curves have a minimum value at the CNP $\Delta_z = \Delta_{SO}$ ($\Delta_z = -\Delta_{SO}$) for the spin up (down)

Complexity measures and topological quantum numbers in 2D gapped Dirac materials 6

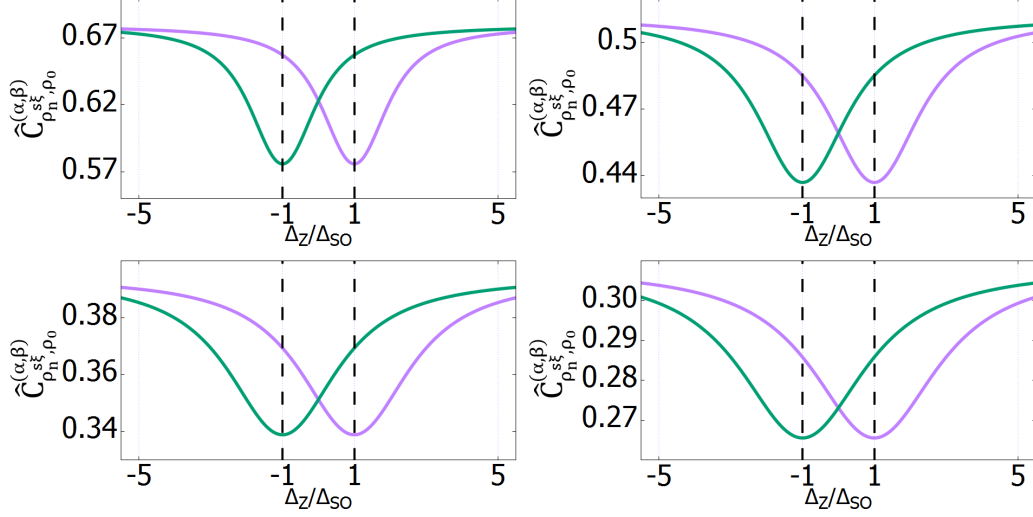


Figure 2. Combined complexity $\hat{C}_{\rho_n^{s\xi}, \rho_0}^{(\alpha, \beta)}$ of electron and holes in position space at valley $\xi = 1$ for $\alpha = 2.5$ and $\beta = 3$ as a function of the electric potential Δ_z for the Landau levels $n = 2$ (left top), 3 (right top), 4 (left bottom) and 5 (right bottom) for $B = 0.01$ T. Magenta lines for $s = +1$ and green lines for $s = -1$. The vertical black dotted grid lines indicate the charge neutrality points.

case. If we take into account the slopes of the curves we can define another topological quantum number that is given by

$$C_2(\Delta_z) = \text{sgn} \left(\frac{\partial}{\partial \Delta_z} \left(\hat{C}_{\rho_n^{s\xi}, \rho_0}^{(\beta, \alpha)} \right) \frac{\partial}{\partial \Delta_z} \left(\hat{C}_{\rho_n^{-s\xi}, \rho_0}^{(\beta, \alpha)} \right) \right). \quad (14)$$

$C_2(\Delta_z)$ has the value 1 in the BI phase and -1 in the TI phase, that is,

$$C_2(\Delta_z) = \begin{cases} 1, & |\Delta_z| > \Delta_{SO} \quad \text{BI} \\ -1, & |\Delta_z| < \Delta_{SO} \quad \text{TI} \end{cases} \quad (15)$$

We have checked that the $C_2(\Delta_z)$'s behavior remains unchanged when we have changed the values of α and β in (13), for other values of the magnetic field and in the valley $\xi = -1$.

4. Conclusions

We have analyzed the relative Rényi entropies and the relative complexity measures of the charge densities of silicene in external magnetic and electric fields using an effective Hamiltonian model. A numerical investigation of these quantities in this system has led us to find out two new topological quantum numbers to characterize the topological insulator and band insulator phases in silicene. The study of the combined relative Rényi entropies $\hat{R}_{\rho_n^{s\xi}, \rho_0}^{(\alpha)}$ and the combined complexity measures $\hat{C}_{\rho_n^{s\xi}, \rho_0}^{(\beta, \alpha)}$ of electron and holes as a function of the electric potential Δ_z , and for spin up and down electrons,

Complexity measures and topological quantum numbers in 2D gapped Dirac materials 7

clearly show that (i) they reach an extremum at the transition points $\Delta_z = \Delta_{SO}$ ($\Delta_z = -\Delta_{SO}$) for spin up (down) electrons (ii) the slopes of these curves for spin up and down Dirac electrons along the different band insulator (BI) and topological insulator (TI) phases provide two (Chern-like) topological quantum numbers $C_1(\Delta_z)$ and $C_2(\Delta_z)$, in fact the TI and BI phases are characterized by the signs of these quantum numbers. These results will be valid for other 2D Dirac materials (for example, germanene or tinene) replacing the interlattice distance, l , the intrinsic spin-orbit coupling, and the Fermi velocity parameters. This informational description can contribute to the better understanding of topological phases in these systems. We are aware of the fact that a more systematic and extensive analysis of this new topological quantum numbers is needed to get a deeper insight into it.

Acknowledgments

The work was supported by the Spanish MINECO Project FIS2014-59386-P and the Junta de Andalucía projects P12-FQM.1861 and FQM-381.

- [1] M. Tahir, U. Schwingenschlögl, Scientific Reports, **3**, 1075 (2013).
- [2] J. Zhao et al. Progress in Materials Science **83**, 24 (2016).
- [3] C. Grazianetti, E. Cinquanta and A. Molle, 2D Mater. **3**, 012001 (2016).
- [4] K. Takeda, K. Shiraishi, Phys. Rev. B **50** (1994) 14916.
- [5] G. G. Guzman-Verri, L. Lew Yan, Phys. Rev. B **76** (2007) 075131.
- [6] S. Cahangirov, M. Topsakal, E. Aktürk, H. Sahin and S. Ciraci, Phys. Rev. Lett. **102**, 236804 (2009).
- [7] M. Ezawa, New Journal of Physics **14** (2012) 033003
- [8] L. Tao et al. Nature Nanotechnology **10**, 227 (2015).
- [9] W-F. Tsai, C-Y. Huang, T-R Chang et al. Nat. Commun. **4**, 1500 (2013).
- [10] Kane C L and Mele E J, Phys. Rev. Lett. **95**, 226801 (2005)
- [11] B. Andrei Bernevig, Taylor L. Hughes and Shou-Cheng Zhang, Science **314**, 1757-1761 (2006).
- [12] X-L. Qui and S-C. Zhang, Physics Today **63**, 33 (2010).
- [13] E. Romera and M. Calixto, EPL, **111**, 37006 (2015).
- [14] M. Calixto and E. Romera, Journal of Statistical Mechanics, P06029 (2015).
- [15] E. Romera and M. Calixto, Journal of Physics: Condensed Matter, **27**, 175003 (2015).
- [16] M. Calixto and E. Romera, EPL, **109**, 40003 (2015).
- [17] E. Romera, J. C. Bolívar, J. B. Roldán and F. de los Santos, EPL **115**, 2008 (2016).
- [18] N. D. Drummond, V. Zólyomi, and V. I. Fal'ko, Phys. Rev. B **85**, 075423 (2012).
- [19] L. Stille, C. J. Tabert, and E. J. Nicol, Phys. Rev. B **86**, 195405 (2012); C.J. Tabert and E.J. Nicol, Phys. Rev. Lett. **110**, 197402 (2013); C.J. Tabert and E.J. Nicol, Phys. Rev. B **88**, 085434 (2013).
- [20] S. Trivedi, A. Srivastava and R. Kurchania, J. Comput. Theor. Nanosci. **11**, 1-8 (2014). doi:10.1166/jctn.2014.3428
- [21] B van den Broek et al. 2D Materials **1** (2014) 021004. doi:10.1088/2053-1583/1/2/021004
- [22] C. C. Liu, W. Feng, and Y. Yao, Phys. Rev. Lett. **107**, 076802 (2011).
- [23] C. C. Liu, H. Jiang, and Y. Yao, Phys. Rev. B **84**, 195430 (2011).
- [24] Rényi A, MTA III. Oszt. Közl. 10 251 (1960) (in Hungarian).
- [25] Á. Nagy and E. Romera, Int. J. Quantum Chem. 109 2490 (2009).
- [26] E. Romera, K. D. Sen and Á. Nagy, J. Stat. Mech. P09016, (2011).
- [27] S. Kullback and R. A. Leibler, Ann. Math. Stat. **22**, 79 (1951); S. Kullback, Statistics and Information Theory (New York: Wiley) (1959).

Complexity measures and topological quantum numbers in 2D gapped Dirac materials 8

- [28] R. López-Ruiz, H. L. Mancini and X. Calbet, Phys. Lett. A **209**, 321 (1995).
- [29] R. López-Ruiz, Á. Nagy, E. Romera and J. Sañudo, J. Math. Phys. **50**, 123528 (2009).
- [30] E. Romera, M. Calixto and Á. Nagy J. Mol. Model. **20**, 2237 (2014).

4.2. Información de Fisher

Se define la información de Fisher para un sistema descrito por una función densidad de probabilidad $p(x)$ normalizada como [58]

$$I_f \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{|p'(x)|^2}{p(x)} dx. \quad (4.3)$$

El significado físico de esta entropía es medir la deslocalización de la función densidad del sistema que estamos estudiando, de forma que, cuanto mayor sea la entropía de Fisher menor será la incertidumbre en la localización de la partícula dentro de nuestro sistema.

En esta ocasión se ha utilizado la información de Fisher para dar cuenta de las transiciones de fase que tienen lugar dentro de los materiales bidimensionales de Dirac. Además de la información de Fisher, también se han utilizado otras herramientas como la varianza, la desigualdad de Cramer-Rao y el principio de incertidumbre de Stam.

Los resultados recopilados se encuentran en el artículo:

J. C. Bolívar, Á. Nagy and E. Romera, Phase-space Fisher information of 2D gapped Dirac materials, *Journal of Mathematical Chemistry*, 1-12 (2019). (Capítulo 4)

DOI: <https://doi.org/10.1007/s10910-019-01015-2>

Phase-space Fisher information of 2D gapped Dirac materials

Juan Carlos Bolívar

Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear and Instituto Carlos I de Física Teórica y Computacional, Universidad de Granada, Fuentenueva s/n 18071 Granada, Spain

E-mail: jcbolivar@ugr.es

Ágnes Nagy

Department of Theoretical Physics, University of Debrecen, H-4002 Debrecen, Hungary

E-mail: anagy@phys.unideb.hu

Elvira Romera

Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear and Instituto Carlos I de Física Teórica y Computacional, Universidad de Granada, Fuentenueva s/n 18071 Granada, Spain

E-mail: eromera@ugr.es

29 April 2019

Abstract.

It is shown that phase-space Fisher information marks topological phase transitions in 2D Dirac gapped materials. The phase-space Fisher information determined for electrons and holes exhibit minimum at the charge neutrality points. Topological quantum numbers are defined to identify different phases utilizing combined information measures. Upper and lower bounds are derived for the phase-space Fisher information.

PACS numbers: 03.65.Vf, 03.65.Pm,

1. Introduction

Information theoretical concepts have become very important in several fields of research. In this paper we focus on phase-space Fisher information (PSFI) [1, 2, 3] and explore how it describes topological phase transitions (TPT). Recently, there has been intense activity in studying Dirac materials. Here we focus on silicene, a 2D crystal of silicon having a low-buckled honeycomb arrangement. Perpendicularly to the silicene sheet, there is a shift in the two sublattices with a buckled height of $l = 0.44\text{\AA}$

due to large interatomic distances. It has a significant spin-orbit interaction giving rise to a small band gap opening at the Dirac point [4, 5]. Silicene is a topological insulator (TI) [6], but it changes to a band insulator (BI) [7] due to the spin-orbit interaction and a transverse external field. 2D TI was theoretically predicted by Kane and Melle [8] and later was observed experimentally in mercury telluride quantum wells [9]. There is an energy gap in a TI, however, the surface states are gapless. A typical feature of a TI-BI transition is a band inversion, when the control parameter (e.g. electric field) attains a critical value. We mention in passing that there are other 2D gapped Dirac materials isostructural with graphene: germanene (Ge), tinene (Sn) or Indiene (In) [10]. There are experimental and theoretical studies of these systems [11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 8, 9, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25].

Information theoretical concepts have already been applied in studying quantum phase transitions [26, 27, 28, 29, 30, 31, 32]. TPT has also been analyzed by Shannon, Rényi and relative information and uncertainty relations [33, 34, 35, 36, 37]. Recently, we have shown that Rényi-Fisher entropy product is a good marker of TPT [38]. All these previous investigations were done in either the position or the momentum space. Here we make an extension and broaden our analysis to the phase space. We select the phase-space Fisher information (PSFI), a quantity that has received almost no attention [3]. It is now shown that PSFI marks TPT since the electron-hole PSFI takes its minimum at the charge neutrality points. We also derive bounds for PSFI and introduce a topological quantum number.

The paper is organized as: TPT in 2D gapped Dirac crystals is summarized in the following section. PSFI of silicene is presented in Section 3, while in Section 4 results for the variance are shown and bounds for the PSFI are derived. The last section contains conclusions.

2. Low energy eigenvalue problem of 2D crystals

The low energy effective Hamiltonian can be written [18] around the Dirac point as

$$H_{\xi s} = v_F(\sigma_x p_x - \xi \sigma_y p_y) - \frac{1}{2} \xi s \Delta_{\text{so}} \sigma_z + \frac{1}{2} \Delta_z \sigma_z. \quad (1)$$

The parameter ξ is applied to mark the inequivalent corners K ($\xi = 1$) and K' ($\xi = -1$) of the Brillouin zone. σ_j are the Pauli matrices and $v_F = 10^6 \text{ ms}^{-1}$ denotes the Fermi velocity of the Dirac fermions. The monolayer silicene film is placed in the external fields. The electric fields \mathcal{E}_z produces a potential difference $\Delta_z = l\mathcal{E}_z$ between the sub-lattices with a separation l . The spin-orbit interaction leads to the band gap Δ_{so} and therefore the Dirac fermions possess a mass [19, 20, 21, 10]. Up (down) spin is marked by $s = \pm 1$. Perpendicularly to the silicene plane a magnetic field B acts. Using the Landau gauge, $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$ in the momentum operator $\hat{\mathbf{p}}_i \rightarrow \hat{\mathbf{p}}_i + q\mathbf{A}_i$, the low energy Hamiltonian takes the form

$$\hat{H}_{s\xi} = \begin{pmatrix} \Delta_{s\xi} & v_F[\xi(\hat{p}_x - \frac{e}{c}By) - i\hat{p}_y] \\ v_F[\xi(\hat{p}_x - \frac{e}{c}By) + i\hat{p}_y] & -\Delta_{s\xi} \end{pmatrix}, \quad (2)$$

Phase-space Fisher information of 2D gapped Dirac materials

3

where

$$\Delta_{s\xi} = \frac{1}{2}(\Delta_z - s\xi\Delta_{s0}). \quad (3)$$

There is a TPT: we have the phase TI if $|\Delta_z| < \Delta_{s0}$ and the phase BI when $|\Delta_z| > \Delta_{s0}$. The effective gap $|\Delta_{s\xi}|$ disappears at CNP [18, 33, 34, 35, 36, 24]. The eigenvalue equation of the model is [19, 20, 21, 10]

$$\hat{H}\psi = \epsilon\psi, \quad (4)$$

where

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} \quad (5)$$

are associated with the sublattices A and B . The solution of Eq. (4) takes the form

$$\epsilon_n^{s\xi} = \begin{cases} \text{sgn}(n)\sqrt{|n|\hbar^2\omega^2 + \Delta_{s\xi}^2}, & n \neq 0, \\ -\xi\Delta_{s\xi}, & n = 0, \end{cases} \quad (6)$$

and

$$|n\rangle_{s\xi} = \begin{pmatrix} -iA_n^{s\xi}||n\rangle - \xi_+\rangle \\ B_n^{s\xi}||n\rangle - \xi_-\rangle \end{pmatrix}. \quad (7)$$

$|n\rangle$ stands for the orthonormal Fock eigenstates of the harmonical oscillator having $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. $\omega = v_F\sqrt{2eB/\hbar}$ is the cyclotron frequency and $\xi_{\pm} = (1 \pm \xi)/2$. The coefficients $A_n^{s\xi}$ and $B_n^{s\xi}$ have the form [24]

$$A_n^{s\xi} = \begin{cases} \text{sgn}(n)\sqrt{\frac{|E_n^{s\xi}| + \text{sgn}(n)\Delta_{s\xi}}{2|E_n^{s\xi}|}}, & n \neq 0, \\ \xi_-, & n = 0, \end{cases} \quad (8)$$

$$B_n^{s\xi} = \begin{cases} \sqrt{\frac{|E_n^{s\xi}| - \text{sgn}(n)\Delta_{s\xi}}{2|E_n^{s\xi}|}}, & n \neq 0, \\ \xi_+, & n = 0 \end{cases}.$$

As we are interested in the density, the plane-wave e^{ikx} can be discarded and we have

$$\langle y|n\rangle = \frac{\omega^{1/4}}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{-\omega y^2/2} H_n(\sqrt{\omega}y) \quad (9)$$

in the position space, where H_n are the Hermite polynomials of degree n . The density arising from (7) can be written as

$$\rho_n^{s\xi}(y) = (A_n^{s\xi})^2 |\langle y||n\rangle - \xi_+\rangle|^2 + (B_n^{s\xi})^2 |\langle y||n\rangle - \xi_-\rangle|^2. \quad (10)$$

The Fock states in momentum space read as

$$\gamma_n^{s\xi}(p_y) = (A_n^{s\xi})^2 |\langle p_y||n\rangle - \xi_+\rangle|^2 + (B_n^{s\xi})^2 |\langle p_y||n\rangle - \xi_-\rangle|^2, \quad (11)$$

where

$$\langle p_y|n\rangle = \frac{\omega^{-1/4}}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{-p_y^2/(2\omega)} H_n(p_y/\sqrt{\omega}). \quad (12)$$

Note that the position and momentum space densities have almost the same form.

3. Phase-space Fisher information

Fisher information (FI) [1] is given by

$$I = \int \frac{[p'(x)]^2}{p(x)} dx, \quad (13)$$

where the probability density function (PDF) $p(x)$ fulfills the condition

$$\int p(x) dx = 1. \quad (14)$$

The Cramer-Rao inequality [2] relates FI to the variance

$$\text{Var}[x] \geq I^{-1}. \quad (15)$$

That is, a narrower PDF leads to a larger FI. Therefore, FI is considered to be a local measure, describing the 'tightness' of a distribution. We have equality in the relation (15) in case of a normal distribution. As FI is a gradient functional of the PDF, it is sensitive to local rearrangements of the density. In a phase transition we have always a sudden change in the properties of the quantum systems. So, FI incorporates information about the localization and shape of the density.

In the knowledge of the position ($\rho_n^{s\xi}(x)$) and momentum ($\gamma_n^{s\xi}(p)$) PDFs, the position-space ($I_{\rho_n^{s\xi}}$) and momentum-space ($I_{\gamma_n^{s\xi}}$) FI can be determined. Applying expressions (10), (11) and (13) we can immediately derive the relation

$$\omega^{-1} I_{\rho_n^{s\xi}} = \omega I_{\gamma_n^{s\xi}}. \quad (16)$$

In this paper the main emphasis is on the PSFI. Earlier it was proved that the sum of the position and momentum space Fisher information is an upper bound of the PSFI [3]. In the following this sum will be referred as PSFI. In our case it takes the form

$$I_n^{s\xi} = \omega^{-1} I_{\rho_n^{s\xi}} + \omega I_{\gamma_n^{s\xi}}. \quad (17)$$

Note that the position part is divided by ω , while the momentum part is multiplied by ω for dimensional reasons [39]. (Unit mass for the oscillator is supposed.) Utilizing Eq. (16) PSFI (17) can also be written as

$$I_n^{s\xi} = 2\omega^{-1} I_{\rho_n^{s\xi}} = 2\omega I_{\gamma_n^{s\xi}} \quad (18)$$

and is shown in Fig. 1. for silicene as a function of Δ_z/Δ_{so} for Landau levels $|n| = 1, 2, 3, 4$ for $\xi = 1$. We can see that electrons and holes (separately) incorporate information about the different phases. The PSFI curves for electrons and holes cross each other when there is a change from the TI to the BI phase, that is, we gain information about TPT when we consider both (electrons and holes) simultaneously. Therefore, we calculated the sum of PSFI for electrons and holes in silicene

$$\hat{I}_n^{s\xi} = I_n^{s\xi} + I_{-n}^{s\xi} \quad (19)$$

and plotted in Fig. 2 versus Δ_z/Δ_{so} . There are minima at the charge neutrality points (CPN) $\Delta_z = \Delta_{so}$ ($\Delta_z = -\Delta_{so}$) for Landau levels $|n| = 0, 1, 2, 3, 4$ both for spin up and down cases. One can also notice that the slopes of the curves have the same sign in the

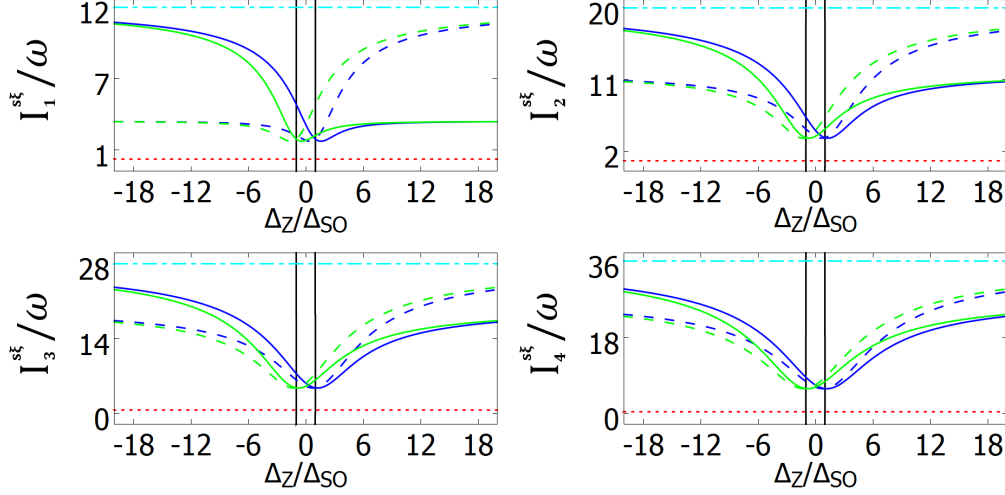


Figure 1. Phase-space Fisher information $I_n^{s\xi}$ against Δ_z/Δ_{so} for the Landau levels $|n| = 1, 2, 3, 4$ and $\xi = 1$. Blue (green) curves stand for spin up (down). Solid lines for n positive and dash lines for n negative. Upper (lower) limit is denoted by cyan dashed (red point) lines.

phase BI ($|\Delta_z| > \Delta_{so}$) and have different sign in the phase TI ($|\Delta_z| < \Delta_{so}$). Taking advantage of this fact we can construct a topological quantum number (TPQ):

$$C_{ns\xi}^1 = sgn \left(\frac{\partial \hat{I}_n^{s\xi}}{\partial \Delta_z} \frac{\partial \hat{I}_n^{-s\xi}}{\partial \Delta_z} \right). \quad (20)$$

This quantity can be considered a topological charge (TC)

$$C_{ns\xi}^1(\Delta_z) = \begin{cases} 1, & |\Delta_z| > \Delta_{SO} & BI \\ -1, & |\Delta_z| < \Delta_{SO} & TI \end{cases} \quad (21)$$

which is capable to identify different phases like the Chern number.

4. Variance and bounds for the Phase-space Fisher information

The variance of the PDF ρ is given by

$$Var(x) = \sigma_x^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - \mu)^2 \rho(x) dx = \langle (x - \mu)^2 \rangle, \quad (22)$$

where

$$\mu = \int_{-\infty}^{+\infty} x \rho(x) dx = \langle x \rangle. \quad (23)$$

It can also be written as

$$Var(x) = \langle x^2 \rangle - \mu^2. \quad (24)$$

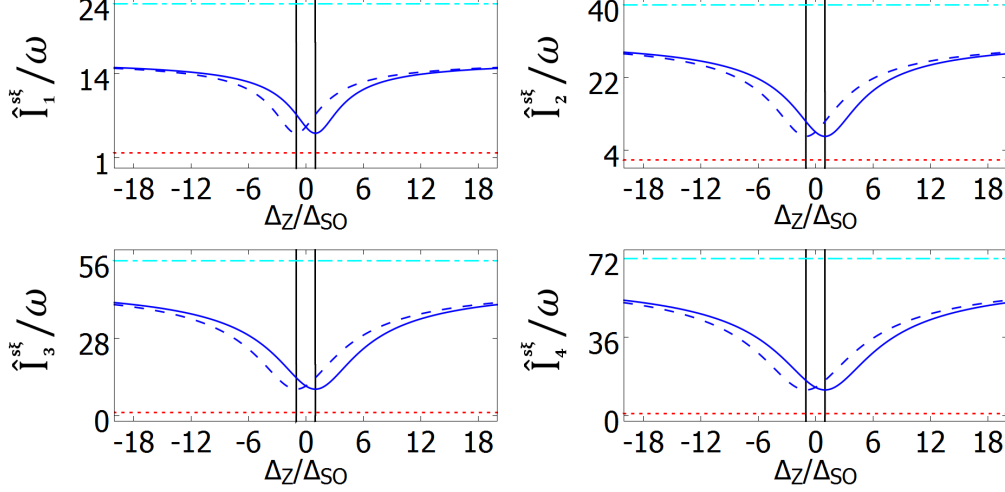


Figure 2. Phase-space Fisher information for electrons and holes $\hat{I}_n^{s\xi}$ against Δ_z/Δ_{s0} for $\xi = 1$ and Landau levels $|n| = 1, 2, 3, 4$. Upper (lower) limit is denoted by cyan dashed (red point) lines.

Taking into account that the PDF studied here are even functions (see Eq. (10)) the expectation value of x disappears: $\langle x \rangle = 0$. Consequently, the variance takes the form

$$\text{Var}(x) = \langle x^2 \rangle. \quad (25)$$

Recall now the well-known expression for the variance of the linear harmonic oscillator

$$\langle x^2 \rangle_n = \frac{\hbar}{\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (26)$$

in the n th quantum state with $\hbar = 1$ in the rest of the paper. (It can be found in most textbooks on quantum mechanics or can be derived from the recursion relation on Hermite polynomials. Unit mass for the oscillator is supposed.) Applying the virial theorem the variance in momentum space can be written as

$$\langle p^2 \rangle_n = \omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (27)$$

The variance for the PDF (10) has the form

$$\langle x^2 \rangle_n^{s\xi} = \frac{1}{\omega} \left[(A_n^{s\xi})^2 \left(|n| - \xi_+ + \frac{1}{2} \right) + (B_n^{s\xi})^2 \left(|n| - \xi_- + \frac{1}{2} \right) \right] \quad (28)$$

Utilizing Eqs. (10), (11), (26) and (27) we can obtain

$$\omega \langle x^2 \rangle_n^{s\xi} = \omega^{-1} \langle p^2 \rangle_n^{s\xi}. \quad (29)$$

If $n = 0$ we obtain $\langle x^2 \rangle_0^{s\xi} = \frac{1}{2\omega}$. Taking into account that $(A_n^{s\xi})^2 = 1 - (B_n^{s\xi})^2$, we are led to

$$\langle x^2 \rangle_n^{s\xi} = \frac{1}{\omega} \left[|n| + \xi \left((B_n^{s\xi})^2 - \frac{1}{2} \right) \right]. \quad (30)$$

Phase-space Fisher information of 2D gapped Dirac materials

7

It can be seen from Eq. (9) that $0 < (B_n^{s\xi})^2 < 1$ if $n \neq 0$. Therefore, we obtain the relations

$$\frac{1}{\omega} \left(|n| - \frac{1}{2} \right) \leq \langle x^2 \rangle_n^{s\xi} \leq \frac{1}{\omega} \left(|n| + \frac{1}{2} \right) \quad (31)$$

and

$$\omega \left(|n| - \frac{1}{2} \right) \leq \langle p^2 \rangle_n^{s\xi} \leq \omega \left(|n| + \frac{1}{2} \right). \quad (32)$$

Taking into account the Cramer-Rao inequality (15) we arrive at the inequality

$$\frac{\omega}{|n| + \frac{1}{2}} \leq I_{\rho_n^{s\xi}}. \quad (33)$$

The corresponding inequality for the momentum space FI has the form

$$\frac{1}{\omega \left(|n| + \frac{1}{2} \right)} \leq I_{\gamma_n^{s\xi}}. \quad (34)$$

Turn now to Stam uncertainty principle

$$I_{\rho_n^{s\xi}} \leq 4\sigma_{\rho_n^{s\xi}} \quad (35)$$

in position space and

$$I_{\gamma_n^{s\xi}} \leq 4\sigma_{\rho_n^{s\xi}} \quad (36)$$

in momentum space. Combining inequalities (31), (32), (35) and (36) we obtain upper bounds to the FI:

$$I_{\rho_n^{s\xi}} \leq 4\omega \left(|n| + \frac{1}{2} \right) \quad (37)$$

and

$$I_{\gamma_n^{s\xi}} \leq \frac{4}{\omega} \left(|n| + \frac{1}{2} \right). \quad (38)$$

Inequalities (33), (34), (37) and (38) can be put together as

$$\frac{\omega}{|n| + \frac{1}{2}} \leq I_{\rho_n^{s\xi}} \leq 4\omega \left(|n| + \frac{1}{2} \right) \quad (39)$$

and

$$\frac{1}{\omega \left(|n| + \frac{1}{2} \right)} \leq I_{\gamma_n^{s\xi}} \leq \frac{4}{\omega} \left(|n| + \frac{1}{2} \right). \quad (40)$$

Note that the bounds do not depend on s and ξ . If $n = 0$ we obtain equalities in relations (39) and (40): $I_{\rho_0^{s\xi}} = 2\omega$ and $I_{\gamma_0^{s\xi}} = 2/\omega$.

Eqs. (16), (17), (18), (19), (33) and (34) lead to lower and upper bounds for PSFI

$$\frac{2}{|n| + \frac{1}{2}} \leq I_n^{s\xi} \leq 8 \left(|n| + \frac{1}{2} \right) \quad (41)$$

and

$$\frac{4}{|n| + \frac{1}{2}} \leq \hat{I}_n^{s\xi} \leq 16 \left(|n| + \frac{1}{2} \right). \quad (42)$$

$\hat{I}_n^{s\xi}$ stands for the electron plus hole PSFI sum. These limits are also presented in Figs. 1. and 2. as horizontal lines for $n = 1, 2, 3, 4$.

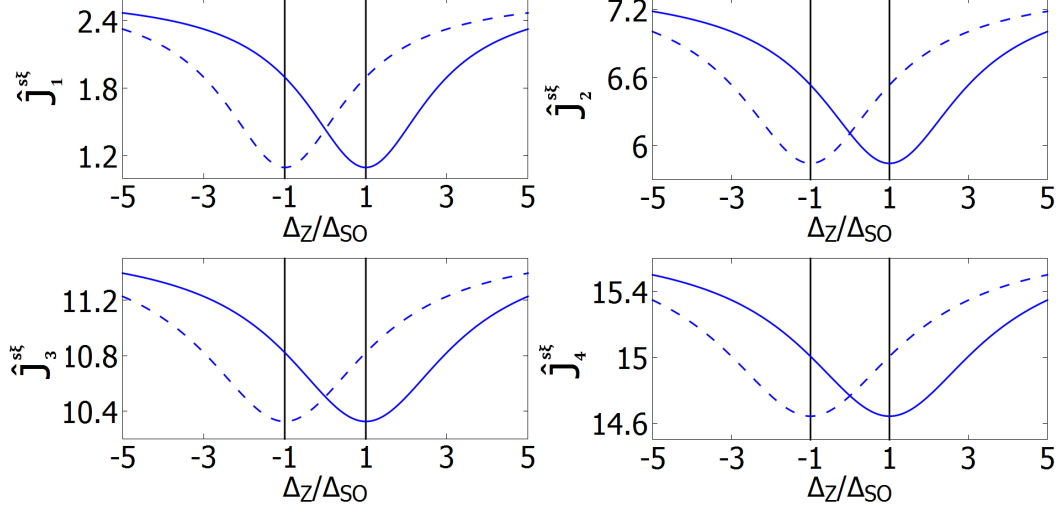


Figure 3. Combined difference $\hat{J}_n^{s\xi}$ for electrons and holes against Δ_z/Δ_{so} for Landau levels $|n| = 1, 2, 3, 4$ for spin up (solid lines) and spin down (dashed lines) in the valley $\xi = 1$.

The plot of the PSFI of electrons plus holes hints that there is a delocalization in the vicinity of CNP-s. However, the variance sum for electrons and holes does not support this assumption.

To obtain further knowledge on the Cramer-Rao inequality (15) define the differences

$$J_{\rho_n^{s\xi}} = \text{Var}_{\rho_n^{s\xi}}(x) - \left(I_{\rho_n^{s\xi}}\right)^{-1} \quad (43)$$

and

$$J_{\gamma_n^{s\xi}} = \text{Var}_{\gamma_n^{s\xi}}(p) - \left(I_{\gamma_n^{s\xi}}\right)^{-1}. \quad (44)$$

The phase-space differences are

$$J_n^{s\xi} = \omega J_{\rho_n^{s\xi}} + \omega^{-1} J_{\gamma_n^{s\xi}} \quad (45)$$

and

$$\hat{J}_n^{s\xi} = J_n^{s\xi} + J_{-n}^{s\xi}. \quad (46)$$

The latter expression for the combined difference for electrons and holes is shown in Fig. 3. There are minima at CNP both for spin up and down cases. The slopes of the curves have the same (opposite) sign in the phase BI (TI) that makes it possible to introduce another form of TQN

$$C_{ns\xi}^2 = \text{sgn} \left(\frac{\partial \hat{J}_n^{s\xi}}{\partial \Delta_z} \frac{\partial \hat{J}_{-n}^{-s\xi}}{\partial \Delta_z} \right). \quad (47)$$

Phase-space Fisher information of 2D gapped Dirac materials

9

This quantity can also be identified as the TC

$$C_{ns\xi}^2(\Delta_z) = \begin{cases} 1, & |\Delta_z| > \Delta_{SO} & BI \\ -1, & |\Delta_z| < \Delta_{SO} & TI \end{cases} \quad (48)$$

Turn now to Stam uncertainty principle ((35) and (36)) and define the position-

$$Z_{\rho_n^{s\xi}} = I_{\rho_n^{s\xi}} - 4\sigma_{\gamma_n^{s\xi}} \leq 0 \quad (49)$$

and momentum-space

$$Z_{\gamma_n^{s\xi}} = I_{\gamma_n^{s\xi}} - 4\sigma_{\rho_n^{s\xi}} \leq 0. \quad (50)$$

differences. One can easily prove that

$$\omega^{-1} Z_{\rho_n^{s\xi}} = \omega Z_{\gamma_n^{s\xi}}. \quad (51)$$

The corresponding phase-space difference is defined as

$$Z_n^{s\xi} = \omega^{-1} Z_{\rho_n^{s\xi}} + \omega Z_{\gamma_n^{s\xi}} \leq 0. \quad (52)$$

It is worth summing the differences of electrons and holes

$$\hat{Z}_n^{s\xi} = Z_n^{s\xi} + Z_{-n}^{s\xi} \leq 0. \quad (53)$$

This quantity is presented in Fig. 4 against Δ_z/Δ_{so} for Landau levels $|n| = 1, 2, 3, 4$ in the valley $\xi = 1$. The curves have minima at the CNP and the slopes of the curves have the same (different) sign in the phase BI (TI). This result provides for defining TQN in another form

$$C_{ns\xi}^3 = \text{sgn} \left(\frac{\partial \hat{Z}_n^{s\xi}}{\partial \Delta_z} \frac{\partial \hat{Z}_n^{-s\xi}}{\partial \Delta_z} \right). \quad (54)$$

TC can be now formalized as

$$C_{ns\xi}^3(\Delta_z) = \begin{cases} 1, & |\Delta_z| > \Delta_{SO} & BI \\ -1, & |\Delta_z| < \Delta_{SO} & TI \end{cases} \quad (55)$$

5. Conclusions

We have analyzed how PSFI characterize TPT in silicene, a 2D Dirac gapped material. The PSFI of electrons plus holes exhibit minimum at the CNP $\Delta_z = \Delta_{so}$ ($\Delta_z = -\Delta_{so}$) for spin up (down) case. Moreover, a TQN capable to identify the different phases has been defined utilizing combined PSFI in three forms. Upper and lower bounds for PSFI have been derived. We have analyzed the difference of the variance and the inverse Fisher measures. It has turned out that the sum of the differences exhibits minima at CPN. TQN can be defined utilizing this quantity. Stam inequality has also turned out to be useful in detecting TPT and defining a TQN. In summary, PSFI has been found to be a new marker of topological phase transitions.

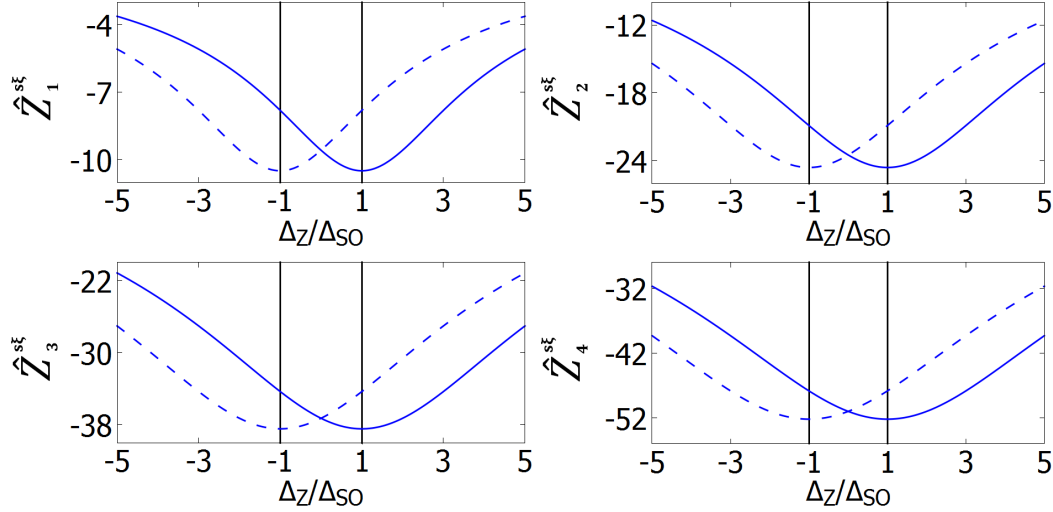


Figure 4. Combined difference $\hat{Z}_n^{s\xi}$ for electrons and holes against Δ_z/Δ_{so} for Landau levels $|n| = 1, 2, 3, 4$ for spin up (solid lines) and spin down (dashed lines) in the valley $\xi = 1$.

Acknowledgments

The work was supported by the Junta de Andalucía project FQM-381 and the National Research, Development and Innovation Fund of Hungary, financed under the 123988 funding scheme and the EU-funded Hungarian grant EFOP-3.6.2-16-2017-00005.

- [1] R. A. Fisher, Proc. Cambridge Philos. Soc. **22** 700 (1925).
- [2] B. R. Frieden, Physics from Fisher Information. A unification; Cambridge: U. P., **1998**.
- [3] I. Hornyák and Á. Nagy, Chem. Phys. Lett. **437** (2007) 132.
- [4] C.-C. Liu, H. Jiang and Y. Yao, Phys. Rev. B **84** 195430 (2011).
- [5] C.-C. Liu, W. Feng and Y. Yao, Phys. Rev. Lett. **107**, 076802 (2011).
- [6] M. Ezawa, J. Phys. Soc. Japan **84**, 121003 (2015).
- [7] M. Xu, T. Liang, M. Shi and H. Chen Chem. Rev. **113** 766 (2013).
- [8] Kane C L and Mele E J, Phys. Rev. Lett. **95**, 226801 (2005).
- [9] B. Andrei Bernevig, Taylor L. Hughes and Shou-Cheng Zhang, Science **314**, 1757-1761 (2006).
- [10] W-F. Tsai, C-Y. Huang, T-R Chang et al. Nat. Commun. **4**, 1500 (2013)
- [11] K. Takeda, K. Shiraishi, Phys. Rev. B **50** (1994) 14916.
- [12] G. G. Guzman-Verri, L. Lew Yan, Phys. Rev. B **76** (2007) 075131.
- [13] P. Vogt et al., Phys. Rev. Lett. **108** (2012) 155501.
- [14] B. Augray, A. Kara, S. B. Vizzini, H. Oughaldou, C. LéAndri, B. Ealet, G. Le Lay, App. Phys. Lett. **96** (2010) 183102.
- [15] B. Lalmi, H. Oughaddou, H. Enriquez, A. Kara, S. B. Vizzini, B. N. Ealet, B. Augray, App. Phys. Letters **97** (2010) 223109.
- [16] A. Feurence, R. Friedlein, T. Ozaki, H. Kawai, Y. Wang, Y. Y. Takamura, Phys. Rev. Lett. **108** (2012) 245501.
- [17] P. E. Padova et al., App. Phys. Lett. **96** (2010) 261905.
- [18] M. Tahir, U. Schwingenschlögl, Scientific Reports, **3**, 1075 (2013).
- [19] N. D. Drummond, V. Zólyomi, and V. I. Fal'ko, Phys. Rev. B **85**, 075423 (2012).

- [20] C. C. Liu, W. Feng, and Y. Yao, Phys. Rev. Lett. **107**, 076802 (2011).
- [21] C. C. Liu, H. Jiang, and Y. Yao, Phys. Rev. B **84**, 195430 (2011).
- [22] S. Trivedi, A. Srivastava and R. Kurchania, J. Comput. Theor. Nanosci. **11**, 1-8 (2014). doi:10.1166/jctn.2014.3428
- [23] B van den Broek et al. 2D Materials **1** (2014) 021004. doi:10.1088/2053-1583/1/2/021004
- [24] L. Stille, C. J. Tabert, and E. J. Nicol, Phys. Rev. B **86**, 195405 (2012); C.J. Tabert and E.J. Nicol, Phys. Rev. Lett. **110**, 197402 (2013); C.J. Tabert and E.J. Nicol, Phys. Rev. B **88**, 085434 (2013).
- [25] M. Ezawa, New Journal of Physics **14** (2012) 033003
- [26] S. J. Gu, Int. J. of Mod. Phys. B **24**, 4371 (2010).
- [27] Wu L. A.; Sarandy M. S.; Lidar D. A.; Sham L. J. Phys. Rev. A **74**, 052335 (2006).
- [28] Nagy, Á.; Calixto M.; Romera, E., J. Chem. Theory Comput. **9**, 1068 (2013).
- [29] Á. Nagy, E. Romera, Phys. Rev. A **88**, 042515 (2013).
- [30] S. J. Gu, Chi. Phys. Lett. **26**, 026401 (2009).
- [31] E. Romera and Á. Nagy, Phys. Lett. A **377**, 3098 (2013).
- [32] Á. Nagy and E. Romera, Europhys. Lett. bf 109 (2015) 60002.
- [33] E. Romera and M. Calixto, EPL, **111**, 37006 (2015).
- [34] M. Calixto and E. Romera, Journal of Statistical Mechanics, P06029 (2015).
- [35] E. Romera and M. Calixto, Journal of Physics: Condensed Matter, **27**, 175003 (2015).
- [36] M. Calixto and E. Romera, EPL, **109**, 40003 (2015).
- [37] J. C. Bolívar and E. Romera, Phys. Lett. A **381**, 1753 (2017).
- [38] J. C. Bolívar, Á. Nagy and E. Romera, Physica A **498**, 66 (2018).
- [39] F. Pennini and A. Plastino, Phys. Lett. A bf 349 (2006) 15.

4.3. Medidas entrópicas de Rényi-Fisher

En esta sección se ha utilizado la información de Rényi-Fisher, la cual se expresa en términos de la entropía de Rényi y la información de Fisher, para caracterizar las transiciones de fase topológicas en nuestro sistema. Además de la información de Rényi-Fisher, también se han utilizado otras dos medidas más para localizar las TPT, las relaciones de incertidumbre de Stam-Rényi y el producto de incertidumbre Stam-Rényi. A partir de estas tres medidas de información se han conseguido definir tres nuevos números cuánticos que ayudan a conocer en qué fase topológica se encuentra el siliceno.

Los resultados obtenidos pueden encontrarse en el artículo:

J. C. Bolívar, Á. Nagy, E. Romera, Rényi–Fisher entropy product as a marker of topological phase transitions, *Physica A*, **498**, pags. 66-73.

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physa.2018.01.024>

Rényi-Fisher entropy product as a marker of topological phase transitions

J. C. Bolívar

Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear and Instituto Carlos I de Física Teórica y Computacional, Universidad de Granada, Fuentenueva s/n 18071 Granada, Spain

E-mail: jcbolivar@ugr.es

Ágnes Nagy

Department of Theoretical Physics, University of Debrecen, H-4002 Debrecen, Hungary

E-mail: anagy@phys.unideb.hu

Elvira Romera

Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear and Instituto Carlos I de Física Teórica y Computacional, Universidad de Granada, Fuentenueva s/n 18071 Granada, Spain

E-mail: eromera@ugr.es

19 February 2018

Abstract. The combined Rényi-Fisher entropy product of electrons plus holes displays a minimum at the charge neutrality points. The Stam-Rényi difference and the Stam-Rényi uncertainty product of the electrons plus holes, show maxima at the charge neutrality points. Topological quantum numbers capable of detecting the topological insulator and the band insulator phases, are defined. Upper and lower bounds for the position and momentum space Rényi-Fisher entropy products are derived.

PACS numbers: 03.65.Vf, 03.65.Pm,

1. Introduction

Information theoretical concepts have significant impact on research in physics. In this paper we show how Rényi-Fisher entropy product [1] can recognize topological phase transitions. Two-dimensional topological insulators have attracted attention in last years. They were theoretically predicted by Kane and Mele [2] using a two dimensional material with a spin-orbit interaction and was observed experimentally in several materials (see [3, 4] and references therein). The 2D Dirac equation has been used to describe low energy electronic properties of several topological

insulators; among others 2D gapped Dirac materials such as silicene, germanene or tinene. These 2D materials were studied both experimentally and theoretically [5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 2, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21] and they are similar to graphene but with a buckled structure (with buckling length l and a significant spin-orbit coupling, Δ_{so}). This buckling length gives the possibility to control the structure by applying an electric field perpendicular to the layer and allows these systems undergo a topological phase transition (TPT) from a topological insulator (TI) to a trivial band insulator (BI). TI- BI transitions are characterized by a band inversion with a level crossing at some critical value of a control parameter (p. e. the electric field) .

It has already been shown that information theoretical concepts are powerful in analyzing quantum phase transitions [22, 23, 24, 25, 26, 27, 28]. Furthermore, it has also turned out that Shannon, Kullback-Leibler, Fisher information and Rényi entropies, uncertainty relations are distinctive indicators of topological phase transitions [29, 30, 31, 32, 33, 34, 35]. In this paper we point out that the Rényi-Fisher entropy product detects topological phase transitions. Namely, the combined Rényi-Fisher entropy product of electrons plus holes displays minimum at the charge neutrality points (CPA). Furthermore, Stam uncertainty relations and Stam- Rényi uncertainty products can be utilized in constructing quantities for electrons and holes that exhibit maxima at CPA. Upper and lower bounds for the position and momentum space Rényi-Fisher entropy products are derived. Moreover, we define topological quantum numbers capable of detecting the topological insulator and the band insulator phases.

The layout of the paper is as follows: topological phase transitions in 2D gapped Dirac materials is reviewed in the following section. In Section 3, first, analytical results for the Rényi-Fisher entropy product are summarized, then calculations for the silicene are presented and a topological quantum number is defined. Section 4. presents Stam uncertainty relations and Rényi-Stam uncertainty products and topological quantum numbers. Conclusions can be found in the last section.

2. Eigenvalue problem in the vicinity of the Dirac point

Our investigation is limited to the vicinity of the Dirac point, where the effective Hamiltonian takes the form [13]

$$H_{\xi s} = v_F(\sigma_x p_x - \xi \sigma_y p_y) - \frac{1}{2} \xi s \Delta_{so} \sigma_z + \frac{1}{2} \Delta_z \sigma_z. \quad (1)$$

The inequivalent corners K and K' of the Brillouin zone are distinguished by the parameter ξ : $\xi = 1$ ($\xi = -1$) stands for K (K'). σ_j denotes the Pauli matrices and v_F is the Fermi velocity of the Dirac fermions. There is an external magnetic field B and an electric field \mathcal{E}_z applied perpendicular to the silicene plane. \mathcal{E}_z produces a potential difference $\Delta_z = l\mathcal{E}_z$ between sub-lattices with a separation l . Δ_{so} is the band gap generated by intrinsic spin-orbit interaction and results a mass to the Dirac fermions [15, 16, 17, 12]. $s = \pm 1$ stands for spin up and down, respectively. In the Landau

Rényi-Fisher entropy product as a marker of topological phase transitions 3

gauge $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$, and the momentum operator can be written as $\hat{\mathbf{p}}_i \rightarrow \hat{\mathbf{p}}_i + q\mathbf{A}_i$. Therefore, the low energy effective Hamiltonian reads as

$$\hat{H}_{s\xi} = \begin{pmatrix} \Delta_{s\xi} & v_F[\xi(\hat{p}_x - \frac{e}{c}By) - i\hat{p}_y] \\ v_F[\xi(\hat{p}_x - \frac{e}{c}By) + i\hat{p}_y] & -\Delta_{s\xi} \end{pmatrix}, \quad (2)$$

where

$$\Delta_{s\xi} = \frac{1}{2}(\Delta_z - s\xi\Delta_{s0}). \quad (3)$$

There exists a topological phase transition from the phase TI with $|\Delta_z| < \Delta_{s0}$ to the phase BI with $|\Delta_z| > \Delta_{s0}$. The effective gap $|\Delta_{s\xi}|$ becomes zero at the charge neutrality points [13, 29, 30, 31, 32, 20]. The eigenvalue equation can be rewritten as [15, 16, 17, 12]

$$\hat{H}\psi = \epsilon\psi. \quad (4)$$

The sublattices A and B are characterized by the components ψ_A and ψ_B of the wave function

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix}. \quad (5)$$

The choice of the vector potential $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$ preserves the translational invariance along the x -axis. The eigenvalues and eigenfunctions take the form

$$\epsilon_n^{s\xi} = \begin{cases} \text{sgn}(n)\sqrt{|n|\hbar^2\omega^2 + \Delta_{s\xi}^2}, & n \neq 0, \\ -\xi\Delta_{s\xi}, & n = 0, \end{cases} \quad (6)$$

and

$$|n\rangle_{s\xi} = \begin{pmatrix} -iA_n^{s\xi}||n\rangle - \xi_+\rangle \\ B_n^{s\xi}||n\rangle - \xi_-\rangle \end{pmatrix}, \quad (7)$$

respectively. $\omega = v_F\sqrt{2eB/\hbar}$ is the cyclotron frequency. $|n\rangle$ stands for the orthonormal Fock eigenstates of the harmonical oscillator with $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ and $\xi_{\pm} = (1 \pm \xi)/2$. The constants $A_n^{s\xi}$ and $B_n^{s\xi}$ in Eq. (7) are [20]

$$A_n^{s\xi} = \begin{cases} \text{sgn}(n)\sqrt{\frac{|E_n^{s\xi}| + \text{sgn}(n)\Delta_{s\xi}}{2|E_n^{s\xi}|}}, & n \neq 0, \\ \xi_-, & n = 0, \end{cases} \quad (8)$$

$$B_n^{s\xi} = \begin{cases} \sqrt{\frac{|E_n^{s\xi}| - \text{sgn}(n)\Delta_{s\xi}}{2|E_n^{s\xi}|}}, & n \neq 0, \\ \xi_+, & n = 0 \end{cases}.$$

The Fock states in position space have the form

$$\langle x|n\rangle = \frac{\omega^{1/4}}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{-\omega x^2/2} H_n(\sqrt{\omega}x), \quad (9)$$

where H_n are the Hermite polynomials of degree n . The density corresponding to the eigenstate (7) reads as

$$\rho_n^{s\xi}(x) = (A_n^{s\xi})^2 |\langle x||n\rangle - \xi_+\rangle|^2 + (B_n^{s\xi})^2 |\langle x||n\rangle - \xi_-\rangle|^2. \quad (10)$$

Rényi-Fisher entropy product as a marker of topological phase transitions 4

The momentum space Fock states are

$$\gamma_n^{s\xi}(p) = (A_n^{s\xi})^2 |\langle p||n| - \xi_+ \rangle|^2 + (B_n^{s\xi})^2 |\langle p||n| - \xi_- \rangle|^2, \quad (11)$$

where

$$\langle p|n \rangle = \frac{\omega^{-1/4}}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{-\omega x^2/2} H_n(p/\sqrt{\omega}). \quad (12)$$

Note the similar forms of the position and momentum space densities. They differ only in the appearance of $\sqrt{\omega}$: in the nominator (denominator) in the argument of the Hermite polynomials in position (momentum) space.

3. Rényi-Fisher entropy product

The Rényi entropy of order α for a probability density function $f(x)$ normalized to one is defined by [36]

$$R_f^\alpha \equiv \frac{1}{1-\alpha} \ln \int f^\alpha(x) dx \quad \text{for } 0 < \alpha < \infty \quad \alpha \neq 1. \quad (13)$$

The limit $\alpha \rightarrow 1$ gives the Shannon entropy [37]

$$S_f \equiv - \int f(x) \ln f(x) dx. \quad (14)$$

The Rényi entropy power of order α is defined by

$$\begin{aligned} N_f^\alpha &\equiv \left(\frac{\alpha}{2\alpha - 1} \right)^{\frac{2\alpha-1}{\alpha-1}} \frac{1}{2\pi} \exp(2R_f^\alpha) \\ &= \beta^{1/(1-\beta)} \frac{1}{2\pi} \exp(2R_f^\alpha), \end{aligned} \quad (15)$$

where β is given by the equation $\alpha^{-1} + \beta^{-1} = 2$. The limit $\alpha \rightarrow 1$ leads to the Shannon entropy power

$$N_f \equiv \frac{1}{2\pi e} e^{2S_f}. \quad (16)$$

The Rényi entropy power has the property [39]

$$N_f^\alpha > N_f^{\alpha'} \quad \alpha < \alpha'. \quad (17)$$

The Rényi entropy and the Rényi entropy power can be constructed in both the position and the momentum spaces: R_ρ^α , N_ρ^α , R_γ^α and N_γ^α , respectively, with the position (ρ) and momentum (γ) densities. The Rényi uncertainty relation [38] can be expressed in terms of Rényi entropy power in a compact form by

$$N_\rho^\alpha N_\gamma^\beta \geq 1/4. \quad (18)$$

The Fisher information of the probability density function f is given by [40, 41]

$$I_f \equiv \int \frac{1}{f(x)} \left(\frac{df(x)}{dx} \right)^2 dx. \quad (19)$$

Rényi-Fisher entropy product as a marker of topological phase transitions

5

The Stam uncertainty principle has the form [42]

$$I_{\rho_n^{s\xi}} \leq 4\sigma_{\gamma_n^{s\xi}} \quad (20)$$

in position space and

$$I_{\gamma_n^{s\xi}} \leq 4\sigma_{\rho_n^{s\xi}} \quad (21)$$

in momentum space. σ_f stands for the variance of the density f .

The Rényi-Fisher information product is defined as

$$P_f^\alpha = N_f^\alpha I_f \quad \text{with} \quad \alpha \in (1/2, 1]. \quad (22)$$

There exist an important inequality, the Rényi-Fisher relation

$$P_f^\alpha \geq 1 \quad \text{with} \quad \alpha \in (1/2, 1]. \quad (23)$$

Combining inequalities (20), (21) and (23) we arrive at the uncertainty relations [1]

$$N_{\rho^\alpha} \geq \frac{1}{4\sigma_\gamma}, \quad \alpha \in (1/2, 1] \quad (24)$$

and

$$N_\gamma^\alpha \geq \frac{1}{4\sigma_\rho}, \quad \alpha \in (1/2, 1]. \quad (25)$$

We calculated the Rényi entropy with the probability density functions $\rho_n^{s\xi}$ (10) and $\gamma_n^{s\xi}$ (11), respectively. We can take advantage of the fact that the densities in position and momentum spaces take almost the same form. The difference appears in the presence of $\sqrt{\omega}$ in the nominator (denominator) in the argument of the Hermite polynomials in position (momentum) space. Introducing the new variable $y = x\sqrt{\omega}$, it can be easily shown that

$$R_{\rho_n^{s\xi}}^\alpha = \frac{1}{1-\alpha} \ln \left[\int_{-\infty}^{\infty} (\rho_n^{s\xi}(x))^\alpha dx \right] = \tilde{R}_{\rho_n^{s\xi}}^\alpha - \frac{1}{2} \ln(\omega) \quad (26)$$

and

$$\tilde{R}_{\rho_n^{s\xi}}^\alpha = \frac{1}{1-\alpha} \ln \left[\int_{-\infty}^{\infty} (\tilde{\rho}_n^{s\xi}(y))^\alpha dy \right], \quad (27)$$

where $\tilde{\rho}_n^{s\xi}$ is the normalized density obtained after the variable change $y = x\sqrt{\omega}$.

The Rényi entropy power reads as

$$N_{\rho_n^{s\xi}}^\alpha = \frac{1}{2\pi\omega} \left(\frac{\alpha}{2\alpha-1} \right)^{\frac{2\alpha-1}{\alpha-1}} \left[\int_{-\infty}^{\infty} (\tilde{\rho}_n^{s\xi}(y))^\alpha dy \right]^{2/(1-\alpha)}. \quad (28)$$

On the other hand, in the momentum space the Rényi entropy takes the form

$$R_{\gamma_n^{s\xi}}^\alpha = \frac{1}{1-\alpha} \ln \left[\int_{-\infty}^{\infty} (\gamma_n^{s\xi}(p))^\alpha dp \right] = \tilde{R}_{\gamma_n^{s\xi}}^\alpha + \frac{1}{2} \ln(\omega), \quad (29)$$

where

$$\tilde{R}_{\gamma_n^{s\xi}}^\alpha = \frac{1}{1-\alpha} \ln \left[\int_{-\infty}^{\infty} (\tilde{\gamma}_n^{s\xi}(y))^\alpha dy \right] \quad (30)$$

and $\tilde{\gamma}_n^{s\xi}$ is the normalized momentum density obtained after the variable change $y = p/\sqrt{\omega}$.

Rényi-Fisher entropy product as a marker of topological phase transitions

6

The Rényi entropy power can be written as

$$N_{\gamma_n^{s\xi}}^\alpha = \frac{\omega}{2\pi} \left(\frac{\alpha}{2\alpha - 1} \right)^{\frac{2\alpha-1}{\alpha-1}} \left[\int_{-\infty}^{\infty} (\tilde{\gamma}_n^{s\xi}(y))^\alpha dy \right]^{2/(1-\alpha)}. \quad (31)$$

The Fisher information reads as

$$I_{\rho_n^{s\xi}} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{((\rho_n^{s\xi}(x))')^2}{\rho_n^{s\xi}(x)} dx = \omega \int_{-\infty}^{\infty} \frac{((\tilde{\rho}_n^{s\xi}(y))')^2}{\tilde{\rho}_n^{s\xi}(y)} dy = \omega \tilde{I}_{\rho_n^{s\xi}} \quad (32)$$

in position space and

$$I_{\gamma_n^{s\xi}} = \omega^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{((\tilde{\gamma}_n^{s\xi}(y))')^2}{\tilde{\gamma}_n^{s\xi}(y)} dy = \omega^{-1} \tilde{I}_{\gamma_n^{s\xi}} \quad (33)$$

in momentum space.

The Rényi-Fisher product takes the form

$$P_{\rho_n^{s\xi}}^\alpha = N_{\rho_n^{s\xi}}^\alpha I_{\rho_n^{s\xi}} = \left(\frac{\alpha}{2\alpha - 1} \right)^{\frac{2\alpha-1}{\alpha-1}} \left[\int_{-\infty}^{\infty} (\tilde{\rho}_n^{s\xi}(y))^\alpha dy \right]^{2/(1-\alpha)} \tilde{I}_{\rho_n^{s\xi}} \quad (34)$$

and

$$P_{\gamma_n^{s\xi}}^\alpha = N_{\gamma_n^{s\xi}}^\alpha I_{\gamma_n^{s\xi}} = \left(\frac{\alpha}{2\alpha - 1} \right)^{\frac{2\alpha-1}{\alpha-1}} \left[\int_{-\infty}^{\infty} (\tilde{\gamma}_n^{s\xi}(y))^\alpha dy \right]^{2/(1-\alpha)} \tilde{I}_{\gamma_n^{s\xi}} \quad (35)$$

in position and momentum spaces, respectively. It follows from Eqs. (10) and (11) that $\tilde{\rho}_n^{s\xi} = \tilde{\gamma}_n^{s\xi}$. Therefore, $\tilde{I}_{\rho_n^{s\xi}} = \tilde{I}_{\gamma_n^{s\xi}}$, $\omega N_{\rho_n^{s\xi}}^\alpha = \omega^{-1} N_{\gamma_n^{s\xi}}^\alpha$ and $P_{\rho_n^{s\xi}}^\alpha = P_{\gamma_n^{s\xi}}^\alpha$. That is, the position and momentum space Rényi-Fisher products are equal. We determined the Rényi-Fisher products for several values of α . Fig. 1. presents $P_{\rho_n^{s\xi}}^\alpha$ for the Landau levels $|n| = 1, 2, 3, 4$ as a function of Δ_z/Δ_{so} with $\alpha = 0.75$, $s = \pm 1$ and $\xi = 1$. The calculations presented here were done with $B = 0.1T$. Other values of B resulted similar behaviour.

Then we calculated the sum of the Rényi-Fisher product for electrons and holes

$$\hat{P}_{f_n^{s\xi}}^\alpha = P_{f_n^{s\xi}}^\alpha + P_{f_{-n}^{s\xi}}^\alpha \quad (36)$$

for several values of α . The combined Rényi-Fisher product $\hat{P}_{f_n^{s\xi}}^\alpha$ is plotted in Fig. 2. for silicene as a function of the ratio Δ_z/Δ_{so} for Landau levels $|n| = 1, 2, 3, 4$ for spin up and spin down in the valley $\xi = 1$. In Eq. (36) f stands either the position (ρ) or the momentum (γ) space density. The curves exhibit minimum at the charge neutrality points $\Delta_z = \Delta_{so}$ ($\Delta_z = -\Delta_{so}$) for spin up (down) case. Furthermore, we can also observe that the slopes of the spin up and down curves have the same sign in the phase BI ($|\Delta_z| > \Delta_{so}$) and have different sign in the phase TI ($|\Delta_z| < \Delta_{so}$). Analogously to the Chern number, based on the combined Rényi-Fisher product we can define a topological quantum number to identify the different phases:

$$C_{f_n^{s\xi}}^1 = \text{sgn} \left(\frac{\partial \hat{P}_{f_n^{s\xi}}^\alpha}{\partial \Delta_z} \frac{\partial \hat{P}_{f_n^{-s\xi}}^\alpha}{\partial \Delta_z} \right). \quad (37)$$

This quantity can be considered a topological charge:

$$C_{f_n^{s\xi}}^1(\Delta_z) = \begin{cases} 1, & |\Delta_z| > \Delta_{SO} & BI \\ -1, & |\Delta_z| < \Delta_{SO} & TI. \end{cases} \quad (38)$$

Rényi-Fisher entropy product as a marker of topological phase transitions

7

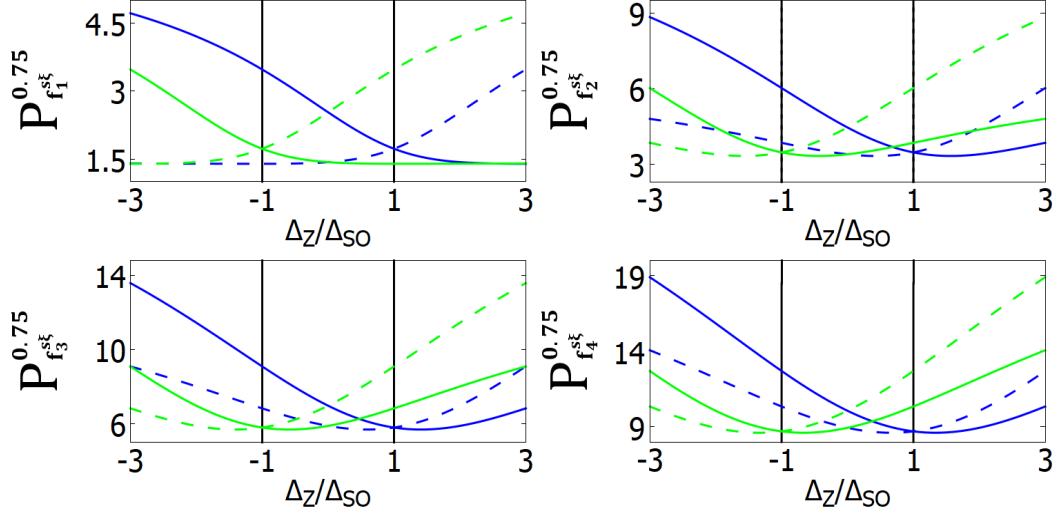


Figure 1. Rényi-Fisher product for the Landau levels $|n| = 1, 2, 3, 4$, as a function of Δ_z/Δ_{so} for spin up (blue lines) and spin down (green lines) and $\alpha = 0.75$ in the valley $\xi = 1$. Solid (dashed) lines represent electrons (holes). f_n stands for the Landau levels $|n|$.

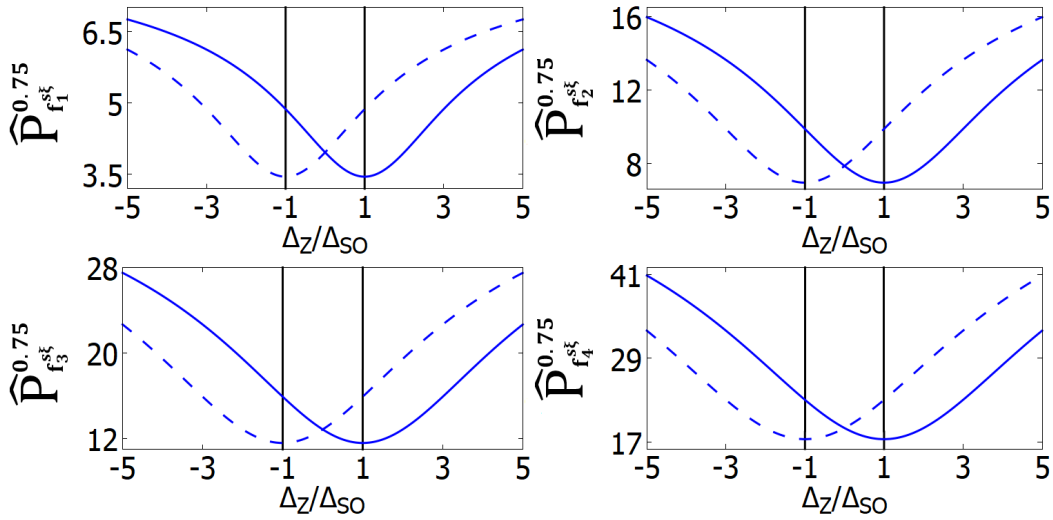


Figure 2. Combined Rényi-Fisher product for the Landau levels $|n| = 1, 2, 3, 4$, as a function of Δ_z/Δ_{so} for spin up (solid lines) and spin down (dashed lines) and $\alpha = 0.75$ in the valley $\xi = 1$. f_n stands for the Landau levels $|n|$.

Rényi-Fisher entropy product as a marker of topological phase transitions

8

4. Stam-Rényi uncertainty relations

Consider now the uncertainty relation (24) and define the differences

$$S_{\rho_n^{s\xi}}^\alpha = N_{\rho_n^{s\xi}}^\alpha - \frac{1}{4\sigma_{\gamma_n^{s\xi}}} \leq 0 \quad (39)$$

and

$$S_{\gamma_n^{s\xi}}^\alpha = N_{\gamma_n^{s\xi}}^\alpha - \frac{1}{4\sigma_{\rho_n^{s\xi}}} \leq 0. \quad (40)$$

in position and momentum spaces, respectively. Then the sum of these differences are constructed for electrons and holes:

$$\hat{S}_{\rho_n^{s\xi}}^\alpha = S_{\rho_n^{s\xi}}^\alpha + S_{\rho_{-n}^{s\xi}}^\alpha \leq 0 \quad (41)$$

and

$$\hat{S}_{\gamma_n^{s\xi}}^\alpha = S_{\gamma_n^{s\xi}}^\alpha + S_{\gamma_{-n}^{s\xi}}^\alpha \leq 0. \quad (42)$$

Eqs. (28) and (29) lead to

$$\omega \hat{S}_{\rho_n^{s\xi}}^\alpha = \omega^{-1} \hat{S}_{\gamma_n^{s\xi}}^\alpha. \quad (43)$$

$\omega \hat{S}_{\rho_n^{s\xi}}^\alpha$ is plotted in Fig. 3. for silicene as a function of the ratio Δ_z/Δ_{so} for Landau levels $|n| = 1, 2, 3, 4$ for spin up and spin down in the valley $\xi = 1$. We obtained exactly the same figure for $\omega^{-1} \hat{S}_{\gamma_n^{s\xi}}^\alpha$. The curves exhibit maxima at the charge neutrality points $\Delta_z = \Delta_{so}$ ($\Delta_z = -\Delta_{so}$) for spin up (down) case. Furthermore, the slopes of the spin up and down curves possess the same sign in the phase BI ($|\Delta_z| > \Delta_{so}$) and different sign in the phase TI ($|\Delta_z| < \Delta_{so}$). Consequently, we can construct another topological quantum number that detects the different phases as the Chern number does:

$$C_{\rho_n^{s\xi}}^2 = \text{sgn} \left(\frac{\partial \hat{S}_{\rho_n^{s\xi}}^\alpha}{\partial \Delta_z} \frac{\partial \hat{S}_{\rho_n^{-s\xi}}^\alpha}{\partial \Delta_z} \right). \quad (44)$$

This quantity can also be recognized as a topological charge:

$$C_{\rho_n^{s\xi}}^2(\Delta_z) = \begin{cases} 1, & |\Delta_z| > \Delta_{so} \quad BI \\ -1, & |\Delta_z| < \Delta_{so} \quad TI. \end{cases} \quad (45)$$

Moreover, we can immediately see that this topological quantum number can be obtained in momentum space, as well:

$$C_{\gamma_n^{s\xi}}^2 = \text{sgn} \left(\frac{\partial \hat{S}_{\gamma_n^{s\xi}}^\alpha}{\partial \Delta_z} \frac{\partial \hat{S}_{\gamma_n^{-s\xi}}^\alpha}{\partial \Delta_z} \right) = C_{\rho_n^{s\xi}}^2. \quad (46)$$

Define now the Stam-Rényi uncertainty products as

$$T_{\rho_n^{s\xi}}^\alpha = N_{\rho_n^{s\xi}}^\alpha 4\sigma_{\gamma_n^{s\xi}} \quad (47)$$

and

$$T_{\gamma_n^{s\xi}}^\alpha = N_{\gamma_n^{s\xi}}^\alpha 4\sigma_{\rho_n^{s\xi}}. \quad (48)$$

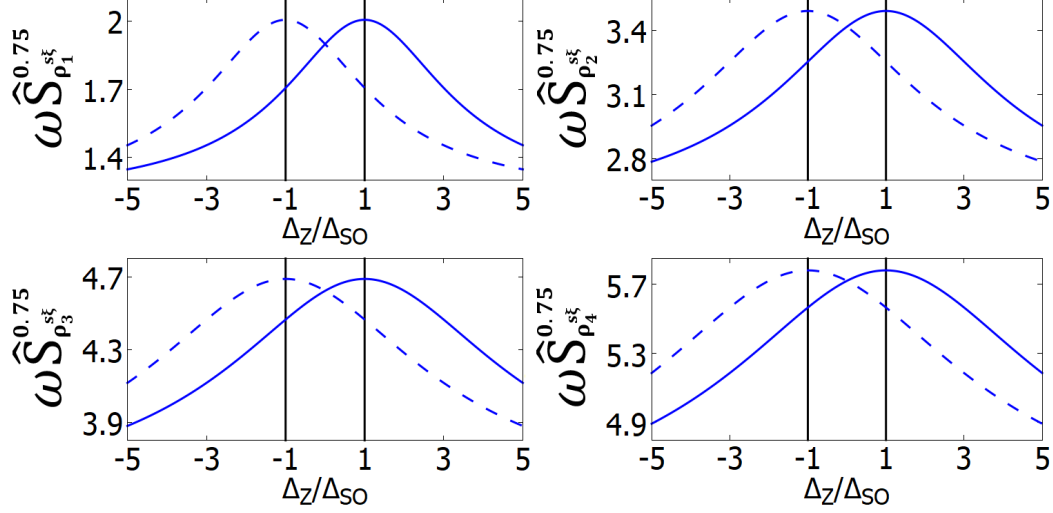


Figure 3. Combined difference $\hat{\omega S}_{\rho_n^{s\xi}}^{\alpha}$ for electrons and holes as a function of Δ_z/Δ_{SO} for Landau levels $|n| = 1, 2, 3, 4$ for spin up (solid lines) and spin down (dashed lines) in the valley $\xi = 1$ in case of $\alpha = 0.75$.

In the previous section we proved that $P_{\rho_n^{s\xi}}^{\alpha} = P_{\gamma_n^{s\xi}}^{\alpha}$. A similar proof can be given to the the assertion $T_{\rho_n^{s\xi}}^{\alpha} = T_{\gamma_n^{s\xi}}^{\alpha}$. Combining the relations (22), (23), (24) and (25) we arrive at the inequalities:

$$1 \leq P_{f_n^{s\xi}}^{\alpha} \leq T_{f_n^{s\xi}}^{\alpha}. \quad (49)$$

That is, the Stam-Rényi uncertainty products $T_{f_n^{s\xi}}^{\alpha}$ act as an upper limit to the Rényi-Fisher entropy products $P_{f_n^{s\xi}}^{\alpha}$. Now, we construct the combined Stam-Rényi uncertainty product for holes and electrons:

$$\hat{T}_{f_n^{s\xi}}^{\alpha} = T_{f_n^{s\xi}}^{\alpha} + T_{f_{-n}^{s\xi}}^{\alpha} \quad (50)$$

In Eq. (50) f stands either the position (ρ) or the momentum (γ) space density. The combined Stam-Rényi uncertainty product $\hat{T}_{f_n^{s\xi}}^{\alpha}$ is plotted in Fig. 4. for silicene as a function of the ratio Δ_z/Δ_{SO} for Landau levels $|n| = 1, 2, 3, 4$ for spin up and spin down in the valley $\xi = 1$. The curves exhibit maxima at the charge neutrality points $\Delta_z = \Delta_{SO}$ ($\Delta_z = -\Delta_{SO}$) for spin up (down) case. Furthermore, we can also observe that the slopes of the spin up and down curves have the same sign in the phase BI ($|\Delta_z| > \Delta_{SO}$) and have different sign in the phase TI ($|\Delta_z| < \Delta_{SO}$). Consequently, we can define a topological quantum number (similar to the Chern number) to identify the different phases utilizing the combined Stam-Rényi uncertainty products:

$$C_{f_n^{s\xi}}^3 = \text{sgn} \left(\frac{\partial \hat{T}_{f_n^{s\xi}}^{\alpha}}{\partial \Delta_z} \frac{\partial \hat{T}_{f_n^{-s\xi}}^{\alpha}}{\partial \Delta_z} \right). \quad (51)$$

Rényi-Fisher entropy product as a marker of topological phase transitions

10

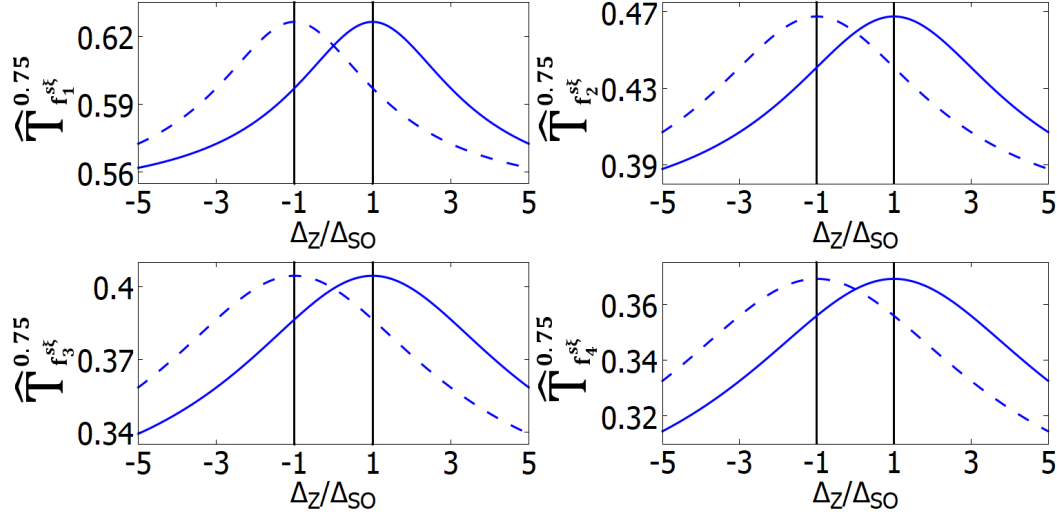


Figure 4. Combined Stam-Rényi uncertainty products $\hat{T}_{f_n^{s\xi}}^{\alpha}$ for electrons and holes as a function of Δ_z/Δ_{so} for Landau levels $|n| = 1, 2, 3, 4$ for spin up (solid lines) and spin down (dashed lines) in the valley $\xi = 1$ in case of $\alpha = 0.75$.

This quantity can be recognized as a topological charge:

$$C_{f_n^{s\xi}}^3(\Delta_z) = \begin{cases} 1, & |\Delta_z| > \Delta_{so} \quad BI \\ -1, & |\Delta_z| < \Delta_{so} \quad TI. \end{cases} \quad (52)$$

5. Conclusions

Rényi-Fisher entropy product has here been presented as a marker of topological phase transitions in silicene. In this 2D Dirac gapped material, there is a topological phase transition from the phase TI with $|\Delta_z| < \Delta_{so}$ to the phase BI with $|\Delta_z| > \Delta_{so}$. The Rényi-Fisher entropy product of electrons plus holes displays minimum at the charge neutrality points $\Delta_z = \Delta_{so}$ ($\Delta_z = -\Delta_{so}$) for spin up (down) case. This quantity can be used to define a topological quantum number capable to identify the different phases. We have proved that the position and momentum space Rényi-Fisher entropy products are equal. We have constructed the Stam-Rényi difference of the electrons plus holes that shows a maximum at the charge neutrality points. This quantity is also suitable for composing a topological quantum number. We have also defined the Stam-Rényi uncertainty product that has the same value in both the position and momentum spaces. Furthermore, it provides an upper bound to the Rényi-Fisher entropy product. Relation (49) gives upper and lower bounds for the Rényi-Fisher entropy product. We have shown that the combined Stam-Rényi uncertainty product for electrons plus holes exhibit a maximum at the charge neutrality points. This quantity has been utilized in defining a topological quantum number.

Acknowledgments

The work was supported by the Junta de Andalucía projects P12-FQM.1861 and FQM-381 and the National Research, Development and Innovation Fund of Hungary, financed under the 123988 funding scheme and the EU-funded Hungarian grant EFOP-3.6.2-16-2017-00005.

- [1] E. Romera and Á. Nagy, *Phys. Lett. A* **372**, 6823 (2008).
- [2] C. L. Kane, and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 226801 (2005).
- [3] B. Andrei Bernevig, Taylor L. Hughes, and Shou-Cheng Zhang, *Science* **314**, 1757-1761 (2006).
- [4] X-L. Qui and S-C. Zhang, *Physics Today* **63**, 33 (2010).
- [5] K. Takeda, K. Shiraishi, *Phys. Rev. B* **50** (1994) 14916.
- [6] G. G. Guzman-Verri, L. Lew Yan, *Phys. Rev. B* **76** (2007) 075131.
- [7] P. Vogt et al., *Phys. Rev. Lett.* **108** (2012) 155501.
- [8] B. Augray, A. Kara, S. B. Vizzini, H. Oughaldou, C. LéAndri, B. Ealet, G. Le Lay, *App. Phys. Lett.* **96** (2010) 183102.
- [9] B. Lalmi, H. Oughaddou, H. Enriquez, A. Kara, S. B. Vizzini, B. N. Ealet, B. Augray, *App. Phys. Letters* **97** (2010) 223109.
- [10] A. Feurence, R. Friedlein, T. Ozaki, H. Kawai, Y. Wang, Y. Y. Takamura, *Phys. Rev. Lett.* **108** (2012) 245501.
- [11] P. E. Padova et al., *App. Phys. Lett.* **96** (2010) 261905.
- [12] W-F. Tsai, C-Y. Huang, T-R Chang et al. *Nat. Commun.* **4**, 1500 (2013)
- [13] M. Tahir, U. Schwingenschlögl, *Scientific Reports*, **3**, 1075 (2013).
- [14] B. Andrei Bernevig Taylor L. Hughes and Shou-Cheng Zhang, *Science* **314**, 1757-1761 (2006).
- [15] N. D. Drummond, V. Zólyomi, and V. I. Fal'ko, *Phys. Rev. B* **85**, 075423 (2012).
- [16] C. C. Liu, W. Feng, and Y. Yao, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 076802 (2011).
- [17] C. C. Liu, H. Jiang, and Y. Yao, *Phys. Rev. B* **84**, 195430 (2011).
- [18] S. Trivedi, A. Srivastava and R. Kurchania, *J. Comput. Theor. Nanosci.* **11**, 1-8 (2014). doi:10.1166/jctn.2014.3428
- [19] B van den Broek et al. *2D Materials* **1** (2014) 021004. doi:10.1088/2053-1583/1/2/021004
- [20] L. Stille, C. J. Tabert, and E. J. Nicol, *Phys. Rev. B* **86**, 195405 (2012); C.J. Tabert and E.J. Nicol, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 197402 (2013); C.J. Tabert and E.J. Nicol, *Phys. Rev. B* **88**, 085434 (2013).
- [21] M. Ezawa, *New Journal of Physics* **14** (2012) 033003
- [22] S. J. Gu, *Int. J. of Mod. Phys. B* **24**, 4371 (2010).
- [23] Wu L. A.; Sarandy M. S.; Lidar D. A.; Sham L. J. *Phys. Rev. A* **74**, 052335 (2006).
- [24] Nagy, Á.,; Calixto M.,; Romera, E., *J. Chem. Theory Comput.* **9**, 1068 (2013).
- [25] Á. Nagy, E. Romera, *Phys. Rev. A* **88**, 042515 (2013).
- [26] S. J. Gu, *Chi. Phys. Lett.* **26**, 026401 (2009).
- [27] E. Romera and Á. Nagy, *Phys. Lett. A* **377**, 3098 (2013).
- [28] Á. Nagy and E. Romera, *Europhys. Lett.* **109** (2015) 60002.
- [29] E. Romera and M. Calixto, *EPL*, **111**, 37006 (2015).
- [30] M. Calixto and E. Romera, *Journal of Statistical Mechanics*, P06029 (2015).
- [31] E. Romera and M. Calixto, *Journal of Physics: Condensed Matter*, **27**, 175003 (2015).
- [32] M. Calixto and E. Romera, *EPL*, **109**, 40003 (2015).
- [33] J. C. Bolívar, Á. Nagy, and E. Romera, *Fisher information and topological insulator phase transitions*, Preprint (2017).
- [34] J. C. Bolívar, E. Romera, *Phys. Lett. A* **381**, 1753 (2017).
- [35] E. Romera, J. C. Bolívar, J. B. Roldán, F. de los Santos, *Europhys. Lett.* **115**, 20008 (2016).
- [36] A. Rényi, in *Proceedings of Fourth Berkeley Symp. on Mathematics, Statistics and Probability*, vol.1. Univ. California Press, Berkeley, 1961, pp.547.

Rényi-Fisher entropy product as a marker of topological phase transitions 12

- [37] C. E. Shannon, Bell Syst. Tech. J. **27**, 379 (1948).
- [38] I. Białynicki-Birula, Phys. Rev. A **74**, 052101 (2006).
- [39] A. Dembo, T. M. Cover, and J. A. Thomas, IEEE Trans. Inf. Theory **37**, 1501 (1991).
- [40] R. A. Fisher, Proc. Cambridge Philos. Soc. **22** 700 (1925).
- [41] B. R. Frieden, Physics from Fisher Information. A unification; Cambridge: U. P., **1998**.
- [42] A. J. Stam, Inf. Cont. **2**, 101 (1959).

Capítulo 5

Caracterización de transiciones de fase topológicas en presencia de un campo láser mediante medidas de información

En este capítulo se han utilizado diversas medidas de información para caracterizar las transiciones de fase topológicas que tienen lugar en siliceno bajo el efecto de campos electromagnéticos perpendiculares a este. Además, en esta ocasión, también se ha considerado la aplicación de un haz de luz láser circularmente polarizada que produce una serie de resultados diferentes a los que se presentaban en ausencia de dicho campo láser.

Las magnitudes de las que nos hemos valido para realizar este estudio son: los coeficientes de participación inversa (IPR), la entropía de Rényi, la entropía de Rényi relativa y la relación de incertidumbre de Rényi. Debido a que ya hemos visto las entropías de Rényi en el tema anterior, aquí solo presentaremos la IPR y la relación de incertidumbre.

IPR es una cantidad que nos permite conocer el número de estados accesibles para una partícula cuando existe una incertidumbre intrínseca sobre la posición que ocupa dicha partícula. Los coeficientes de participación inversa vienen dados por [43]

$$I_f = \int_{-\infty}^{\infty} (f(x))^2 dx, \quad (5.1)$$

donde $f(x)$ es una distribución de probabilidad normalizada.

IPR ha sido estudiada en [43] resultando ser una buena herramienta para localizar las transiciones de fase topológicas que tienen lugar en el siliceno en ausencia de un campo láser. La IPR se

relaciona con la entropía de Rényi con $\alpha = 2$ de la siguiente forma

$$R_f^{(2)} = -\log(I_f). \quad (5.2)$$

Por otro lado, las relaciones de incertidumbre de Rényi también han sido estudiadas en [44] resultando ser útiles en la labor de caracterizar las TPTs en modelos sin la presencia de luz láser. La relación de incertidumbre de Rényi viene dada por

$$U_{ns\xi}^\alpha = R_{\rho_n^{s\xi}}^\alpha + R_{\gamma_n^{s\xi}}^\beta \geq -\frac{1}{1-\alpha} \ln \frac{\alpha}{\pi} - \frac{1}{1-\beta} \ln \frac{\beta}{\pi}, \quad (5.3)$$

donde se debe cumplir $\alpha^{-1} + \beta^{-1} = 2$. Esta relación de incertidumbre da cuenta de como de des-localizada está la función de onda.

Los resultados obtenidos en esta sección han sido publicados en:

E. Romera, M. Calixto and **J. C. Bolívar**, Information measures and topological-band insulator transitions in 2D-Dirac materials under external circularly polarized lasers, and static electric and magnetic fields, *Physica A*, **511**, 174-181 (2018).

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physa.2018.07.048>

**Information measures and topological-band insulator transitions
in 2D-Dirac materials under external circularly polarized lasers,
and static electric and magnetic fields**

E. Romera

*Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear and
Instituto Carlos I de Física Teórica y Computacional,
Universidad de Granada, Fuentenueva s/n 18071 Granada, Spain*

M. Calixto

*Departamento de Matemática Aplicada and Instituto
Carlos I de Física Teórica y Computacional,
Universidad de Granada, Fuentenueva s/n 18071 Granada, Spain*

J. C. Bolívar

*Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear &
Instituto Carlos I de Física Teórica y Computacional,
Universidad de Granada, Fuentenueva s/n 18071 Granada, Spain*

Abstract

The graphene family of 2D-Dirac materials shows different topological phases induced by the application of electric fields and the circularly polarized lasers. In this paper we present an informational analysis of these topological phases. Additionally, we determine the entropic uncertainty of these systems in the plane given by the electric and light fields, showing the different topological phases.

I. INTRODUCTION

Topological insulator behavior (time-reversal symmetry-protected edge states) was predicted in [1] and observed in mercury telluride quantum wells [2], and in many others systems later (see e.g. [3, 4]). Topological insulators are nowadays considered a singular state of matter [5–7]. The case of 2D topological insulators was predicted theoretically by Kane and Mele [8], studying the effects of spin orbit interactions on the low energy electronic structure of graphene (Quantum Spin Hall Effect). Actually, the graphene family is usually referred to the group of monolayer honeycomb materials like: silicene, germanene, stanene, plumbene, etc, which are 2D allotropes of Si, Ge, Sn and Pb atoms, respectively, instead of carbon [9, 10]. An important difference with graphene is that they exhibit a much stronger intrinsic spin-orbit coupling that opens a gap Δ_{so} in their electronic band structure that ranges from 4.2 (silicene) to 200 (plumbene) meV. They also have a buckled structure [11–15], with their two inequivalent sublattices lying in two distinct parallel planes separated by a distance 2ℓ (see Figure 1) The lattice distortion (compared to graphene) is due

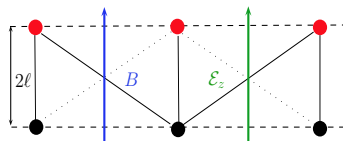


FIG. 1: Illustration of the buckled honeycomb lattice (cross section) of a member of the graphene family in the presence of perpendicular electric \mathcal{E}_z and magnetic B fields. Red and black sites form two sublattices separated by a distance 2ℓ that ranges from $2\ell = 0.46\text{\AA}$ (Si) to $2\ell = 3.00\text{\AA}$ (Pb). Arbitrary units.

to the large ionic radius of the atoms compared to carbon (a stronger sp^3 bonding). This buckled structure allows a response of these materials to the presence of an out-of-plane static electric field $E_z = \Delta_z/(e2\ell)$, where Δ_z denotes the staggered sublattice potential and e the electron charge. The electric field then provides a tunable band gap (Dirac mass) $\Delta_s^\xi = (\Delta_z - s\xi\Delta_{\text{so}})/2$, with $s = \pm 1$ the spin and $\xi = \pm 1$ the Dirac valley.

Optical response of the graphene family has also been recently studied in [16, 17]. Indeed, a (left + and right -) circularly polarized laser of intensity I and frequency ω also modifies the band structure [18]. Its interaction with the monolayer is described through the coupling

constant $\Lambda = \pm 8\pi\alpha v_F^2 I/\omega^3$ provided $4|\Lambda|\hbar\omega/3t^2 \ll 1$, where α is the fine structure constant, $v_F = \sqrt{3}at/2\hbar$ the Fermi velocity, a is the lattice constant and t is the nearest neighbor coupling or transfer energy. The Dirac mass gets a contribution from the coupling to the laser field as $\Delta_s^\xi = (\Delta_z - s\xi\Delta_{so} + \xi\lambda)/2$, where we have set $\lambda = 2\Lambda$. Rashba couplings are neglected due to their small effect compared to the intrinsic spin-orbit coupling. We also disregard additional couplings between the energy bands caused by the light field.

The graphene family exhibits several electronic phases resulting from changes in Δ_s^ξ induced by the electric field Δ_z and the light field λ [18]. These phases are characterized the Chern number $C = \frac{1}{2} \sum'_{s,\xi=\pm 1} \xi \text{sgn}(\Delta_s^\xi)$, where the prime in the summation indicates that only non-vanishing $\Delta_s^\xi \neq 0$ terms should be included. In particular, silicene displays three distinct topological phases, in addition to the trivial band insulator (BI) phase. For zero electric Δ_z and laser λ fields, silicene is a quantum spin-Hall insulator (QSHI), which is a particular type of topological insulator (TI). When Δ_z increases and crosses the charge neutrality point $|\Delta_z| = |\Delta_{so}|$ (where silicene is a semimetal), it undergoes a phase transition to a BI. Applying a strong circular polarized laser at fixed Δ_z , silicene is transformed from a QSHI or a BI into a photoinduced spin-polarized quantum Hall insulator (PS-QHI) and eventually into a photoinduced quantum Hall insulator (P-QHI), where velocities of up and down spins are different. At the crossing points of the two phase boundaries, $(\Delta_z = 0, \lambda = \Delta_{so})$ and $(\Delta_z = \Delta_{so}, \lambda = 0)$, silicene is a spin-polarized metal (SPM) and spin-valley-polarized semi-metal (SVPM), respectively. Note that the band gaps at $\xi = \pm 1$ Dirac cones can be made different, and a new interesting state, called single-Dirac cone (SDC), is formed along a phase boundary that has only one closed gap with a linear dispersion [18].

In this article we propose the use of information measures of Hamiltonian eigenvectors to explore the phase diagram in the $\Delta_z - \lambda$ plane. These are localization measures that turn out to display different monotonic properties in the diverse phases, thus providing an alternative characterization to the traditional Chern-number approach. This approach has been already used in [19–22] to identify topological-band insulator transitions in 2D-gapped Dirac materials. Moreover, these information theoretic measures have proved to be useful in characterizing standard quantum phase transitions in some paradigmatic models like: the superradiant phase in the Dicke model of atom-field interactions [23–27], the linear-to-bent transition in the vibron model of molecules [28–30] and the ubiquitous Lipkin-Meshkov-Glick model [31, 32].

The paper is organized as follows. In section II we present the Dirac-like Hamiltonian for the low energy band structure at the vicinity of the Dirac points. In section III we study several information measures to describe topological phase transitions, defining topological-like quantum numbers. In section IV we relate uncertainty relations and topological phase transitions. Finally, the last section is left for conclusions.

II. LOW ENERGY HAMILTONIAN AND EIGENSTATES

The low energy band structure in the vicinity of the Dirac points $\xi = \pm 1$ is described by a Dirac-like Hamiltonian [41, 42]

$$H_{s\xi} = v_F(\sigma_x p_x - \xi \sigma_y p_y) + \Delta_s^\xi \sigma_z \quad (1)$$

with Dirac mass

$$\Delta_s^\xi = \frac{\Delta_z - s\xi \Delta_{so} + \xi \lambda}{2}. \quad (2)$$

This Hamiltonian is obtained from a nearest-neighbor tight-binding model, plus an external electric field perpendicular to the plane of the material and irradiated with circularly polarized light [18].

We shall apply a perpendicular magnetic field \vec{B} , which is implemented in the Hamiltonian (1) through the minimal coupling $\vec{p} \rightarrow \vec{p} + e\vec{A}$ for the momentum, where $\vec{A} = (-By, 0)$ is the vector potential in the Landau gauge, that is

$$H_{s\xi} = \begin{pmatrix} \Delta_s^\xi & v_F[\xi(p_x - eBy) - ip_y] \\ v_F[\xi(p_x - eBy) + ip_y] & -\Delta_s^\xi \end{pmatrix}. \quad (3)$$

The Hamiltonian eigenvalues at the ξ points are given by

$$E_n^{s\xi}(\Delta_z, \lambda) = \begin{cases} \text{sgn}(n) \sqrt{|n| \hbar^2 \omega^2 + (\Delta_s^\xi)^2}, & n \neq 0, \\ -\xi \Delta_s^\xi, & n = 0, \end{cases} \quad (4)$$

where the dependence of $E_n^{s\xi}$ with the electric field Δ_z and the light field λ is implicit inside the Dirac mass (2) and $\omega = v_F \sqrt{2eB/\hbar}$. The Hamiltonian eigenvectors are given in terms of Fock states $|m\rangle$ as

$$|n\rangle_{s\xi} = \begin{pmatrix} -iA_n^{s\xi} | |n\rangle - \xi_+ \rangle \\ B_n^{s\xi} | |n\rangle - \xi_- \rangle \end{pmatrix} \quad (5)$$

with coefficients

$$A_n^{s\xi} = \begin{cases} \operatorname{sgn}(n) \sqrt{\frac{|E_n^{s\xi}| + \operatorname{sgn}(n)\Delta_s^\xi}{2|E_n^{s\xi}|}}, & n \neq 0, \\ \xi_-, & n = 0, \end{cases}$$

$$B_n^{s\xi} = \begin{cases} \sqrt{\frac{|E_n^{s\xi}| - \operatorname{sgn}(n)\Delta_s^\xi}{2|E_n^{s\xi}|}}, & n \neq 0, \\ \xi_+, & n = 0 \end{cases}.$$
(6)

where $\xi_\pm = (\xi \pm 1)/2$.

We know that Fock (number) states $|n\rangle$ can be written in position representation as

$$\langle y|n\rangle = \frac{\omega^{1/4} e^{-\omega y^2/2}}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(\sqrt{\omega} y)$$

where H_n are the Hermite polynomials of degree n . The Hamiltonian eigenvector density in position (y) representation is

$$\rho_n^{s\xi}(y) = (A_n^{s\xi})^2 \rho_{|n|-\xi_+}(y) + (B_n^{s\xi})^2 \rho_{|n|-\xi_-}(y)$$
(7)

with

$$\rho_n(y) = |\langle y|n\rangle|^2 = \frac{\omega^{1/2} e^{-\omega y^2}}{2^n n! \sqrt{\pi}} H_n^2(\sqrt{\omega} y)$$
(8)

the number-state density. In momentum (p) representation, the Hamiltonian eigenvector density is

$$\gamma_n^{s\xi}(p) = (A_n^{s\xi})^2 \gamma_{|n|-\xi_+}(p) + (B_n^{s\xi})^2 \gamma_{|n|-\xi_-}(p),$$
(9)

where

$$\gamma_n(p) = \frac{\omega^{-1/2} e^{-p^2/\omega}}{2^n n! \sqrt{\pi}} H_n^2(p/\sqrt{\omega}).$$
(10)

III. INFORMATION THEORETICAL MEASURES AND TOPOLOGICAL QUANTUM NUMBERS

In this section we will use several information theoretical measures to describe topological phase transitions. We will consider the Inverse Participation Ratio (IPR), the Rényi entropy and the relative Rényi entropy. These entropies are closely related to the Havrda-Charvát entropies [39] (see also Daróczy [40] and Tsallis [38]). Rényi entropies have been calculated

using numerical quadratures. Among other applications, these information measures have also been used to describe quantum phase transitions in some paradigmatic models like: the Dicke model of atom-field interactions [23–27], the vibron model of molecules [28–30], the so called Lipkin-Meshkov-Glick model [31, 32] and silicene in an external magnetic and electric field [19–22, 33, 34]. In this paper we will prove the usefulness of Rényi entropies in characterizing the topological phase transitions in 2D Dirac materials under external circularly polarized lasers.

A. Inverse Participation Ratio

The inverse participation ratio for a density function $f(y)$ is defined as

$$I_f = \int_{-\infty}^{\infty} f^2(y) dy, \quad (11)$$

The IPR of a Hamiltonian eigenstate in position representation is then calculated as

$$I_{\rho_n^{s\xi}} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} (\rho_n^{s\xi}(y))^2 dy. \quad (12)$$

In this case, the IPR in position and momentum spaces are proportional, $I_{\gamma_n^{s\xi}} = \omega I_{\rho_n^{s\xi}}$. We shall also restrict ourselves to the valley $\xi = 1$, omitting this index from (5) and (7). All the results for the valley $\xi = 1$ are straightforwardly translated to the valley $\xi = -1$ by swapping electrons for holes (i.e., $n \leftrightarrow -n$), spin up for down (i.e., $s \leftrightarrow -s$) and the sign of λ . The integral (12) can be calculated for every n and gives

$$I_{\rho_n^s} \equiv (A_n^s)^4 M_{|n|-1, |n|-1} + (B_n^s)^4 M_{|n|, |n|} + 2(A_n^s B_n^s)^2 M_{|n|, |n|-1}. \quad (13)$$

where

$$M_{n,m} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \rho_n(x) \rho_m(x) dx \quad (14)$$

are integrals of Hermite density products for $n, m = 0, 1, 2, 3, \dots$. This kind of integrals are studied in [43]. $M_{n,m}$ can be seen as the elements of the infinite dimensional matrix \mathcal{M}

$$\mathcal{M} = \sqrt{\frac{\omega}{2\pi}} \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{3}{8} & \frac{5}{16} & \dots \\ \frac{1}{2} & \frac{3}{4} & \frac{7}{16} & \frac{11}{32} & \dots \\ \frac{3}{8} & \frac{7}{16} & \frac{41}{64} & \frac{51}{128} & \dots \\ \frac{5}{16} & \frac{11}{32} & \frac{51}{128} & \frac{147}{256} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix},$$

We will use the combined IPR of electrons plus holes

$$\hat{I}_{\rho_n^s} = I_{\rho_n^s} + I_{\rho_{-n}^s} \quad n \geq 0 \quad (15)$$

to characterize the TI and BI phases (as in Ref. [20]). Fig. 2 shows the value of $\hat{I}_{\rho_n^{s\xi}}$ around the critical point $\Delta_{zc} = -\Delta_{so} + \lambda$ as a function of the electric potential Δ_z and the laser coupling λ for $s = 1$ and the Landau level $n = 2$, for $B = 10^{-2}$ T (we shall use this value of B all along the paper). We can see that the combined IPR decreases when it goes from $-2\Delta_{so}$ to $-\Delta_{so} + \lambda$ and increases when it goes from $-\Delta_{so} + \lambda$ to $2\Delta_{so}$, when λ goes from $-2\Delta_{so}$ to $2\Delta_{so}$. In fact, we can see that there is a minimum at the critical point $\Delta_z = -\Delta_{so} + \lambda$. We have checked this behavior for other Landau levels and changing the spin and the valley, and we always obtain a minimum at the critical point.

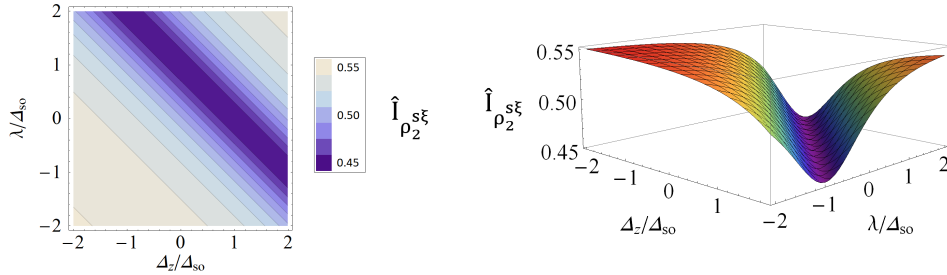


FIG. 2: $\hat{I}_{\rho_n^{s\xi}}$ (in in position space at valley $\xi = 1$ as a function of the normalized electric potential Δ_z/Δ_{so} and the laser coupling constant λ/Δ_{so} for $s = 1$ and the Landau level $n = 2$. Arbitrary units.

B. Rényi entropy

The Rényi entropy [35, 44] of a density $f_n^{s\xi}$ function is defined as:

$$R_{f_n^{s\xi}}^\alpha \equiv \frac{1}{1-\alpha} \ln \int_{-\infty}^{\infty} (f_n^{s\xi}(y))^\alpha dy, \quad 0 < \alpha < \infty, \alpha \neq 1, \quad (16)$$

For the particular case $\alpha = 1$ we have the Shannon entropy $-\int_{-\infty}^{\infty} f_n^{s\xi}(y) \ln(f_n^{s\xi}(y))$ and for $\alpha = 2$ we have the relation with the IPR, $-\ln I_f = R_f^2$. The parameter α plays a role of focus on head and tails of distributions and it can be considered a tuning parameter to better analyze the topological phases. Again, we will use the combined, electrons plus holes,

Rényi entropy [33, 34] to characterize the topological phase transition:

$$\hat{R}_{f_n^{s\xi}}^\alpha = R_{f_n^{s\xi}}^\alpha + R_{f_{-n}^{s\xi}}^\alpha \quad n \geq 0 \quad (17)$$

The combined Rényi entropy shows in fig. 3 a maximum at the critical point $\Delta_{zc} = -\Delta_{so} + \lambda$

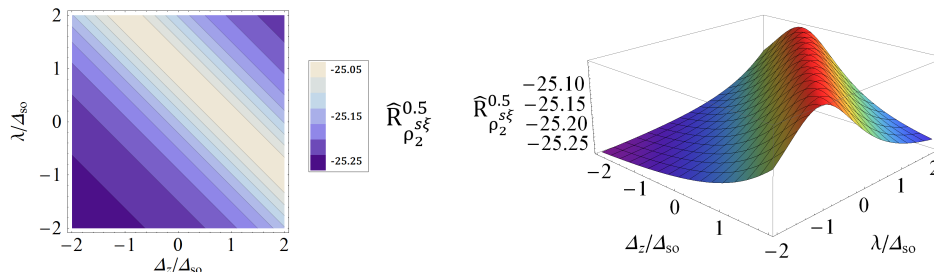


FIG. 3: $\hat{R}_{\rho_2^{s\xi}}^\alpha$ in position space at valley $\xi = 1$ as a function of the normalized electric potential Δ_z/Δ_{so} and the laser coupling constant λ/Δ_{so} for $s = 1$ and the Landau level $n = 2$ and $\alpha = 0.5$. Arbitrary units.

when we change the electric potential and the laser coupling from $-2\Delta_{so}$ to $2\Delta_{so}$.

C. Relative Rényi entropy

Let us consider now the relative Rényi entropy [36], given in terms of the two normalized functions $f_n^{s\xi}$ and $f_0 \equiv f_0^{s\xi}$ as

$$R_{f_n^{s\xi}, f_0}^\alpha = \begin{cases} \frac{1}{\alpha-1} \ln \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(f_n^{s\xi}(y))^\alpha}{(f_0^{s\xi}(y))^{\alpha-1}} dy, & 0 < \alpha < \infty, \alpha \neq 1, \\ \int_{-\infty}^{\infty} f_n^{s\xi}(y) \ln \left(\frac{f_n^{s\xi}(y)}{f_0^{s\xi}(y)} \right), & \alpha = 1 \end{cases} \quad (18)$$

Again, the combined relative Rényi entropy is written as the sum of the relative Rényi entropy for electrons plus holes

$$\hat{R}_{f_n^{s\xi}, f_0}^\alpha = R_{f_n^{s\xi}, f_0}^\alpha + R_{f_{-n}^{s\xi}, f_0}^\alpha \quad n \geq 0 \quad (19)$$

In this case we have a similar behavior than in the case of the combined IPR of electrons plus holes. For the sake of illustration we show the combined electrons and holes relative Rényi entropy in fig. 4 for $s = 1$, the Landau level $n = 2$ and $\alpha = 1$ and we can see that it presents a minimum at the critical point $\Delta_{zc} = -\Delta_{so} + \lambda$ when the electric potential and the laser coupling go from $-2\Delta_{so}$ to $2\Delta_{so}$. We have studied the combined relative Rényi entropy for other values of α obtaining the same behavior.

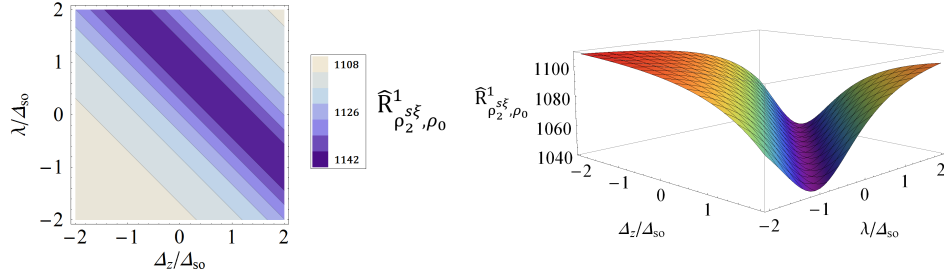


FIG. 4: $\hat{R}_{f_n^{s\xi}, f_0}^\alpha$ in position space at valley $\xi = 1$ as a function of the normalized electric potential Δ_z/Δ_{so} and the laser coupling constant λ/Δ_{so} for $s = 1$ and the Landau level $n = 2$ and $\alpha = 1$. Arbitrary units.

D. Topological-like quantum numbers

Now, using above quantities we can define topological-like quantum numbers as

$$C_n^{s\xi}(\Delta'_z) = \text{sgn} \left(\frac{\partial Y_n^{s\xi}}{\partial \Delta'_z} \frac{\partial Y_n^{-s\xi}}{\partial \Delta'_z} \right) \quad (20)$$

where $\Delta'_z = \Delta_z + \xi\lambda$ and $Y_n^{s\xi}$ denotes any of the combined entropic measures defined above. We have checked that

$$C_n^{s\xi}(\Delta'_z) = \begin{cases} +1, & |\Delta'_z| > \Delta_{so} \quad BI \\ -1, & |\Delta'_z| < \Delta_{so} \quad TI \end{cases} \quad (21)$$

for any Hamiltonian eigenstate, which characterizes the band insulator (BI) and topological insulator (TI) phases. Now, we shall define $C = \frac{1}{2} \sum_\xi C^\xi(\Delta'_z)$. In figure 5 we have plotted C as a function of Δ_z/Δ_{so} and λ/Δ_{so} , showing that: when $C = -1$ (purple regions) the systems behaves like a topological insulator, whereas when $C = 1$ (light brown regions) it behaves like a band insulator and when $C = 0$ (light blue regions) the system is a topological insulator in one valley and a band insulator in the other one.

IV. UNCERTAINTY RELATIONS

Recently, the relation between the topological phase transitions and the entropic and the variance-based uncertainty relation has been explored in [21]. Now we will explore the description of topological phase transitions by means of Rényi uncertainty relations. The

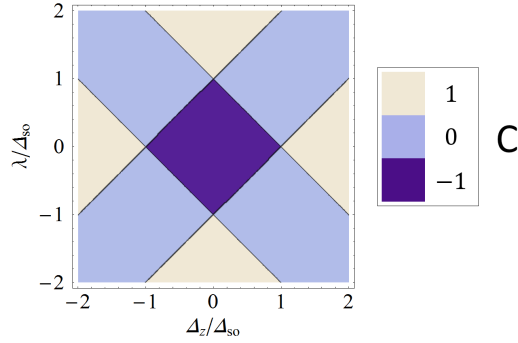


FIG. 5: C as a function of Δ_z/Δ_{so} y λ/Δ_{so} . Arbitrary units.

Rényi uncertainty relation is given by [37]

$$U_{ns\xi}^\alpha = \hat{R}_{\rho_n^{s\xi}}^\alpha + \hat{R}_{\gamma_n^{s\xi}}^\beta \geq -\frac{1}{(1-\alpha)} \ln \frac{\alpha}{\pi} - \frac{1}{(1-\beta)} \ln \frac{\beta}{\pi}, \quad (22)$$

with $\frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\beta} = 2$. In the limit $\alpha \rightarrow 1$ the Rényi uncertainty relation reduces to Shannon's and both are saturated by the Gaussian distribution. Rényi entropy in position space measures the uncertainty in the localization of the wave function in position space and, equivalently, in the momentum space, so the higher the Rényi entropy is, the lower the accuracy in the localization of the wave function and vice versa. Next, we will make use of the Rényi uncertainty relation (22) to study topological phase transitions in silicene for different values of the electric potential Δ_z/Δ_{so} and laser coupling λ/Δ_{so} . We have used different values of α parameter obtaining similar results. We show the result for $\xi = 1$, $n = 2$, $s = 1$ and $\alpha = 2$ in figure 6. We have found that the uncertainty has a maximum at the critical values $\Delta_{zc} = -\Delta_{so} + \lambda$ when we change Δ_z and λ from $-2\Delta_{so}$ to $2\Delta_{so}$, which means that the wave function delocalizes and spreads at the topological phase transition.

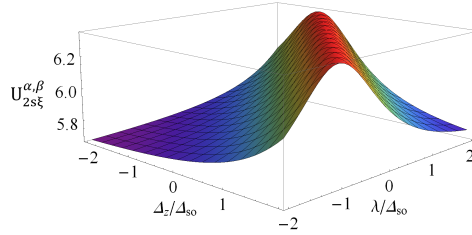


FIG. 6: Uncertainty relation $U_{ns\xi}^{\alpha,\beta}$ for $\xi = 1$, $n = 2$, $s = 1$, $\alpha = 2$, and $\beta = 2/3$. Arbitrary units.

V. CONCLUSIONS

We have studied topological-band insulator transitions in silicene in the presence of perpendicular electric and magnetic fields and interacting with circularly polarized laser. We have analyzed the inverse participation ratio, finding that it reaches minima at the critical points. Also we have defined the combined electrons and holes Rényi entropies showing that these measures detect the topological phase transition showing maxima at the critical points. The examination of the relative Rényi entropies display minima at the critical points. We have explored a wide range of α parameter values and we have obtained analogous results for all of them, showing a representative value in each case.

We have defined a new topological-like quantum number using the abovementioned entropic measures. The defined topological number C gets the value 1 when silicene behaves like a band insulator, the value -1 when it behaves like a topological insulator and 0 when the system is a topological insulator in one valley and a band insulator in the other one.

Finally we have analyzed the relation between the topological phase transition and the Rényi uncertainty relation finding that this uncertainty relation has a minimum at the critical values showing that the wave function delocalizes and spreads at the topological phase transition.

All the results can be simply generalized for the other members of the graphene family, that is, germanene, stanene and plumbene.

Acknowledgments

This research was supported by the Junta de Andalucía project FQM-381.

Bibliography

-
- [1] O.A. Pankratov, S.V. Pakhomov, B.A. Volkov, Solid State Communications 61 (1987) 93-96.
 - [2] M. König et al., Science. 318 (2007): 766-770.
 - [3] B. Andrei Bernevig, Taylor L. Hughes, Shou-Cheng Zhang, Science **314** (2006) 1757-1761
 - [4] X-L. Qui, S-C. Zhang, Phys. Today **63** (2010) 33
 - [5] M. Z. Hasan, C. L. Kane, Rev. Mod. Phys. **82** (2010) 3045
 - [6] X-L., Qi, S-C. Zhang, Rev. mod. Phys. **83** (2011) 1057
 - [7] K. He, Y. Wang, Q-K. Xue, Natl. Sci. Rev. **1** (2014) 38
 - [8] C. L. Kane, E.J. Mele, Phys. Rev. Lett. **95** (2005) 226801
 - [9] J.Zhao, et al., Prog Mater. Sci. **83** (2016) 24
 - [10] C. Grazianetti, E. Cinquanta, A. Molle, 2D Mater. **3** (2016) 012001
 - [11] K. Takeda and K. Shiraishi, Phys. Rev. B **50**, (1994) 14916.
 - [12] G. G. Guzman-Verri and L. Lew Yan, Phys. Rev. B **76**, 075131 (2007).
 - [13] S. Cahangirov et al., Phys. Rev. Lett. **102** (2009) 236804
 - [14] M. Ezawa, New J. of Phys. **14**, (2012) 033003 .
 - [15] L. Tao, et a., Nat. Nanotechnol. **10** (2015) 227.
 - [16] P. Rodriguez-Lopez et al. Nature Communications (2017) DOI: 10.1038/ncomms14699
 - [17] P. Ledwith, W. J. M. Kort-Kamp, D. A. R. Dalvit, Phys. Rev. B **97**,(2018) 165426
 - [18] M. Ezawa, Phys. Rev. Lett. **110**, 026603 (2013).
 - [19] E. Romera and M. Calixto, EPL, **111**, 37006 (2015).
 - [20] M. Calixto and E. Romera, Journal of Statistical Mechanics, P06029 (2015).
 - [21] E. Romera and M. Calixto, Journal of Physics: Condensed Matter, **27**, 175003 (2015).
 - [22] M. Calixto and E. Romera, EPL, **109**, 40003 (2015).
 - [23] E. Romera, K. Sen and Á Nagy, J. Stat. Mech. P09016 (2011)
 - [24] E. Romera, M. Calixto and Á Nagy Europhys. Lett. **97** (2012) 20011
 - [25] M. Calixto et al., Phys. Rev. A **85** (2012) 053813
 - [26] E. Romera, R. del Real and M. Calixto Phys. Rev. A **85** (2012) 053831
 - [27] E. Romera and Á Nagy Phys. Lett. **375** (2011) 3066

- [28] M. Calixto, R. del Real and E. Romera Phys. Rev. A **86** (2012) 032508
- [29] M. Calixto, E. Romera and R. del Real J. Phys. A: Math. Theor. **45** (2012) 365301
- [30] M. Calixto and F. Pérez-Bernal Phys. Rev. A **89** (2014) 032126
- [31] E. Romera, M. Calixto and O. Castaños O Phys. Scr. **89** (2014) 095103
- [32] M. Calixto, O. Castaños and E. Romera Europhys. Lett. **108** (2014) 47001
- [33] J. C. Bolívar, Á. Nagy and E. Romera , Physica A , **498** (2018) 66 .
- [34] J. C. Bolívar and E. Romera, Physics Letters A, **381** (2017) 1753-1756.
- [35] A. Rényi, MTA III, Oszt. Kzl. **10** (1960) 251 (in Hungarian)
- [36] S. Kullback, R. A. Leibler, Ann. Math. Stat. **22** (1951) 79; S. Kullback, Statistics and information Theory, Wiley, New York, 1959.
- [37] I. Bialynicki-Birula, Phys. Rev. A **74**, 052101 2006 .
- [38] C. Tsallis, J. Statist. Phys. **52**, 479 (1988).
- [39] J. Havrda and F. Charvát, Kybernetika (Prague) **3**, 30 (1967).
- [40] Z. Daróczy, Information and Control **16**, 36 (1970).
- [41] Tabert C J and Nicol E J Phys. Rev. Lett. **110** 197402 (2013).
- [42] Tabert C J and Nicol E J 2013 Phys. Rev. **88** 085434 (2013).
- [43] R. D. Lord, Journal of the London Mathematical Society, **s1-24** 101 (1949).
<https://doi.org/10.1112/jlms/s1-24.2.101>
- [44] A. Rényi, Proc. Fourth Berkeley Symp. on Math. Statist. and Prob., **1**, 547 (Univ. of Calif. Press, 1961).

Conclusiones generales

En el desarrollo de esta tesis se ha utilizado un modelo de Hamiltoniano efectivo que describe el comportamiento de los materiales pertenecientes a la familia del grafeno. Aunque esta familia de materiales es amplia, nosotros nos hemos centrado en el estudio del siliceno, pudiendo extender de forma sencilla los resultados encontrados para el resto de materiales de Dirac bidimensionales. Mediante el uso de este Hamiltoniano, hemos conseguido caracterizar y localizar lo que se conoce como transición de fase topológica, esto es, la transición entre un aislante de banda convencional a un aislante topológico. Esta transición de fase tiene lugar en los puntos de carga neutra que son aquellos puntos donde el acoplamiento espín-órbita se cancela con el campo eléctrico, es decir, cuando $\Delta_{s\xi} = 0$. Para realizar esta caracterización, se han utilizado diversas magnitudes físicas y se ha estudiado su comportamiento en los ya citados CNPs, esto es, en Δ_{SO} ($-\Delta_{SO}$) para $s = 1$ ($s = -1$).

En primer lugar, mediante el estudio de medidas relacionadas con la evolución temporal de paquetes de onda (corrientes y Fidelidad) hemos podido encontrar comportamientos interesantes que nos han permitido caracterizar las TPTs. Por un lado, mediante el análisis del comportamiento de la evolución temporal de paquetes de onda electrónicos en una monocapa de siliceno bajo la influencia de un campo magnético y otro eléctrico (ambos perpendiculares a la lámina de material 2D) se ha comprobado que aparecen dos periodicidades, clásica y revival, que alcanzan valores extremos en los CNPs. Además, el comportamiento de las corrientes, j_x y j_y , para diferentes valores del campo eléctrico proporcionan una caracterización adicional de las TPTs, debido a que la amplitudes de las corrientes, M_x y M_y , alcanzan un valor extremo en los puntos críticos. Por otro lado, hemos estudiado la Fidelidad (tanto dependiente como independiente del tiempo) como una función de la intensidad del campo eléctrico aplicado. Para esto, hemos utilizado dos tipos de paquetes de onda, siendo un paquete Gaussiano el de Tipo I y uno tipo gato el de Tipo II. En este sistema aparecen varias escalas temporales que se han denominado como periodicidades Loschmidt: Zitterbewegung, clásica y revival. Dichas periodicidades divergen cerca de los CNPs por lo que son un buen indicador de la TPT. Adicionalmente, se ha encontrado que la amplitud de la Fidelidad también es un buen marcador de la TPT debido a que alcanza un valor extremo en los CNPs.

En segundo lugar, también se han conseguido caracterizar las TPTs mediante el uso de medidas

de información. La información de Fisher, las relaciones de incertidumbre de Stam o medidas de complejidad han sido algunas de las magnitudes utilizadas.

Mediante un análisis numérico tanto de la entropía relativa de Rényi como de medidas de complejidad relativa, ambas relacionadas con la función densidad, hemos conseguido caracterizar las transiciones de fase topológicas en siliceno. En primera instancia, el estudio de la entropía combinada de Rényi, $\hat{R}_{\rho_n^{s\xi}, \rho_0}^{(\alpha)}$, y las medidas de complejidad combinada, $\hat{C}_{\rho_n^{s\xi}, \rho_0}^{(\beta, \alpha)}$, de electrones y huecos como funciones del potencial eléctrico, Δ_z , nos han permitido caracterizar las TPTs debido a que estas magnitudes alcanzan valores extremos en los puntos de carga neutra. Además, el estudio de las pendientes de las curvas que describen estas cantidades nos ha permitido definir dos nuevos números cuánticos topológicos (similares al número de Chern) cuyos signos caracterizan la fase aislante (de banda o topológico) en la que se encuentra el sistema.

La información de Fisher también ha resultado útil como marcador de las TPTs en siliceno. Hemos comprobado que la suma de la información de Fisher de electrones y huecos muestra un mínimo en los CNPs. Con esta medida se ha conseguido definir un número cuántico topológico nuevo capaz de identificar las diferentes fases aislantes del sistema. Se ha conseguido establecer una relación sencilla entre las medidas de Fisher en el espacio de momentos y de posiciones. Por otro lado, la suma combinada de la información de Fisher de electrones y huecos muestra un mínimo en los puntos de carga neutra. Además, hemos encontrado límites superiores e inferiores para la información de Fisher tanto en el espacio de momentos como en el de posiciones. Hemos analizado la diferencia de la varianza y la inversa de la medida de Fisher encontrando que la suma de esta cantidad para electrones y huecos alcanza valores mínimos en los puntos de carga neutra. A partir de esta medida, se ha podido definir un nuevo número cuántico tanto en el espacio de momentos como en el espacio de posiciones. También nos hemos valido de las desigualdades de Stam para detectar las transiciones de fase topológicas y definir otro número cuántico topológico. De forma complementaria, se han obtenido otras ligaduras inferiores y superiores para la información de Fisher modificada combinada.

El producto entrópico de Rényi-Fisher ha sido otra buena herramienta para identificar la transición de fase topológica en siliceno. La suma del producto entrópico de Rényi-Fisher de electrones y huecos muestra un mínimo en los puntos de carga neutra, pudiendo usar esta cantidad para definir un nuevo número cuántico topológico capaz de identificar las diferentes fases del sistema. Se ha demostrado que el producto entrópico de Rényi-Fisher es igual tanto en el espacio de momentos como en el de posiciones. Por otra parte, hemos construido la diferencia de la relación de incertidumbre de Stam-Rényi para electrones y huecos que muestra un máximo en los puntos de carga neutra. Esta cantidad es también útil para construir un número cuántico topológico. Hemos definido también el producto de incertidumbre de Stam-Rényi cuyo valor en los espacios de momentos y de posiciones coincide. Adicionalmente, hemos encontrado un límite superior para el producto entrópico de Rényi-Fisher. Complementariamente, hemos encontrado una relación que permite

establecer un límite (tanto superior como inferior) al producto entrópico de Rényi-Fisher. Hemos mostrado que la incertidumbre combinada del producto entrópico de Stam-Rényi para electrones y huecos exhibe un máximo en los puntos de carga neutra, hecho que ha sido útil en la determinación de otro número cuántico topológico similar al número de Chern.

En tercer lugar, en el último capítulo de esta tesis, se ha utilizado el modelo de Hamiltoniano efectivo en sistemas compuestos por una lámina de siliceno bajo la influencia (además de los campos electromagnéticos que ya teníamos) de un haz láser de luz circularmente polarizada. En este tipo de sistemas se ha detectado que las TPTs se producen también en los puntos donde $\Delta_{s\xi} = 0$ con la peculiaridad de que ahora nuestro sistema puede acceder a una cantidad de estados aislantes más grande que antes. Mediante el uso de medidas de la información hemos conseguido caracterizar los lugares donde se producen estas TPTs y, adicionalmente, hemos conseguido definir un número cuántico que nos aporta información extra sobre los posibles estados a los que puede acceder el sistema. Bajo estas condiciones, hemos analizado el coeficiente de participación inversa (IPR), encontrando que alcanza un valor mínimo en los puntos críticos. También hemos definido la entropía combinada de Rényi de electrones y huecos que muestra un valor máximo en los puntos de carga neutra. Tras la exploración de la entropía relativa de Rényi se ha detectado que tiene un valor mínimo en los puntos críticos. Se ha observado el mismo comportamiento para un amplio abanico de valores de α considerados y de los que se ha mostrado un valor representativo en cada caso. Hemos podido definir un nuevo número cuántico topológico utilizando las medidas de información anteriores. Este número topológico adquiere el valor 1 cuando el siliceno se comporta como un aislante, el valor -1 cuando se comporta como un aislante topológico y 0 cuando el sistema es un aislante topológico en un valle y un aislante de banda convencional en el otro. Por último, hemos analizado la relación entre la transición de fase topológica y la relación de incertidumbre de Rényi, encontrando que esta relación de incertidumbre posee un mínimo en los puntos de carga neutra, lo que muestra que la función de onda se deslocaliza y se propaga en la transición de fase topológica.

Todos los resultados encontrados en este trabajo para el siliceno pueden ser extendidos de forma sencilla a los demás materiales de Dirac bidimensionales (germaneno, estaneno o plumbeno) sin más que modificar los valores de los parámetros característicos de este material: distancia intrarred l , acoplamiento espín-órbita Δ_{SO} y velocidad de Fermi v_F .

Algunas de las propiedades y comportamientos que se han encontrado a lo largo de este trabajo podrían ser utilizados para el desarrollo de nuevos dispositivos de interferencia cuántica (como, por ejemplo, dispositivos FET).

General conclusions

We have utilized an effective Hamiltonian model for our calculations. This Hamiltonian describes the behavior of a sheet of silicene (this material belongs to the Dirac materials family) under two electromagnetics fields (one electric and another magnetic). With this model, we have been able to charazterize the topological phase transitions in this type of materials.

We have shown that the evolution of wave packets can be used as a tool to characterize topological band-insulator transitions in silicene. In particular, we have used an effective Hamiltonian model to analyze the time evolution of electron wave packets in a monolayer of silicene under perpendicular electric and magnetic fields. Two different periodicities appear in this system, the classical and revival times. Both quantities reach a maximum at the CNP Δ_{SO} ($-\Delta_{\text{SO}}$) for $s = 1$ ($s = -1$), thus providing a characterization of the TPT. Moreover, the behavior of the amplitudes of the electron currents, j_x and j_y , for different values of the electric field provides an additional characterization of the TPTs, inasmuch the maximum value of the currents, M_x and M_y , reaches a maximum value at the CNPs. We have checked that this is a common feature for different values of the magnetic field.

We have studied Zitterbewegung, classical and revival periods for silicene as a function of electric field intensity when the electric field is changed by a very small amount. We have used two different kinds of wave packets. Type I packet is a simple Gaussian while Type II is a double Gaussian cat state. We have shown that all three Loschmidt periods diverge close to the charge neutrality point. The offset with respect to this point is determined by the amount the electric field is changed. We have also proven that time-independent as well as time-dependent fidelities can be used as markers of topological phase transitions in silicene (and other 2D gapped materials) and that time-independent fidelity is equal to the maximum of the time-dependent one for Type I packets but not for Type II packets.

We have analyzed the relative Rényi entropies and the relative complexity measures of the charge densities of silicene in external magnetic and electric fields using an effective Hamiltonian model. A numerical investigation of these quantities in this system has led us to find out two new topological quantum numbers to characterize the topological insulator and band insulator phases in silicene. The study of the combined relative Rényi entropies $\hat{R}_{\rho_n^{s\xi}, \rho_0}^{(\alpha)}$ and the combined complexity measures $\hat{C}_{\rho_n^{s\xi}, \rho_0}^{(\beta, \alpha)}$ of electrons and holes as a function of the electric potential Δ_z , and for spin up

and down electrons, clearly show that (i) they reach an extremum at the transition points (ii) the slopes of these curves for spin up and down Dirac electrons along the different band insulator (BI) and topological insulator (TI) phases provide two (Chern-like) topological quantum numbers, in fact the TI and BI phases are characterized by the signs of these quantum numbers.

We have studied how Fisher information characterizes topological phase transitions in silicene. The Fisher information of electrons plus holes exhibits a minimum at the charge neutrality points. Moreover, a topological quantum number capable to identify the different phases has been defined utilizing combined Fisher measures. We have derived a simple relation between position and momentum space Fisher measures. The phase space entropy sum has been also investigated here. The modified combined Fisher information sum of electrons plus holes shows a minimum at the charge neutrality points. Upper and lower bounds for the Fisher information have been derived both in position and momentum spaces. Furthermore, we have analyzed the difference of the variance and the inverse Fisher measures. It has turned out that the sum of the differences for electrons and holes exhibits minima at the charge neutrality points. A topological quantum number can be defined utilizing this quantity both in position and momentum spaces. Stam inequality has also turned out to be useful in detecting topological phase transitions and defining a topological quantum number. Finally, upper and lower bounds have been obtained for the phase-space Fisher information.

Rényi-Fisher entropy product has been presented here as a marker of topological phase transitions in silicene. The Rényi-Fisher entropy product of electrons plus holes displays a minimum at the charge neutrality points. This quantity can be used to define a topological quantum number capable to identify the different phases. We have proved that position and momentum space Rényi-Fisher entropy products are equal. We have constructed the Stam-Rényi difference of the electrons plus holes that shows a maximum at the charge neutrality points. This quantity is also suitable for composing a topological quantum number. We have also defined the Stam-Rényi uncertainty product that has the same value in both position and momentum spaces. Furthermore, it provides an upper bound to the Rényi-Fisher entropy product. We have found a relation that gives upper and lower bounds for the Rényi-Fisher entropy product. We have shown that the combined Stam-Rényi uncertainty product for electrons plus holes exhibits a maximum at the charge neutrality points. This quantity has been utilized in defining a topological quantum number.

We have also studied topological-band insulator transitions in silicene in the presence of perpendicular electric and magnetic fields and interacting with circularly polarized laser radiation. We have analyzed the inverse participation ratio, finding that it reaches minima at the critical points. We have also defined the combined electrons and holes Rényi entropies showing that these measures detect the topological phase transition showing maxima at the critical points. The examination of the relative Rényi entropies shows minima at the critical points. We have explored a wide range of α parameter values and we have obtained analogous results for all of them, showing a representative value in each case. In addition, we have defined a new topological-like quantum number

using the abovementioned entropic measures. The defined topological number C gets the value 1 when silicene behaves like a band insulator, the value -1 when it behaves like a topological insulator and 0 when the system is a topological insulator in one valley and a band insulator in the other one. Furthermore, we have analyzed the relation between the topological phase transition and the Rényi uncertainty relation finding that this uncertainty relation has a minimum at the critical values showing that the wave function delocalizes and spreads at the topological phase transition.

Besides, all the results found here can be simply generalized for the other members of the 2D Dirac materials family, that is, germanene, stanene and plumbene, by changing the interlattice distance, l , the intrinsic spin-orbit coupling, and the Fermi velocity parameters.

Bibliografía

- [1] P. R. Wallace, *Phys. Rev.*, **71**, 622 (1947).
- [2] A. K. Geim, A. H. MacDonald, *Physics Today*, **60**, 35-41 (2007).
- [3] R. Roldán et al., *Chem. Soc. Rev.*, **46**, 4387 (2017).
- [4] https://en.wikipedia.org/wiki/Abundance_of_elements_in_Earth's_crust
- [5] K. S. Novoselov, et al., *Science*, **306**, 666–669 (2004).
- [6] CORE-Materials: <https://www.flickr.com/photos/core-materials/5057399792/sizes/z/in/photostream/>
- [7] Keith R. Paton et al., *Nat. Mater.* **13**, 624–630 (2014).
- [8] W. A. de Heer and C. Berger, *J. Phys. D: Applied Physics*, **45**, 150301–150302 (2012).
- [9] L. Tang et al., *J. Mat. Chem.*, **22**, 5676 (2012).
- [10] P. Li and I. Appelbaum, *Phys. Rev. B*, **90**, 115439 (2014).
- [11] J. Castellanos-Gómez, *Phys. Chem. Lett.*, **6**, 4280-4291 (2015).
- [12] J. Quereda et al., *Nano Lett.*, **16**, 2931-2937 (2016).
- [13] R. Fei et al., *Appl. Phys. Lett.*, **107**, 173104 (2015).
- [14] R. Roldán et al., *Ann. Phys.*, **526**, 347-357 (2014).
- [15] L. Tao et al., *Nat. Nanotechnol.*, **10**, 227–231 (2015).
- [16] K. Takeda y K. Shiraishi, *Phys. Rev. B*, **50**, 14916 (1994).
- [17] G. G. Guzman-Verri and L. Lew Yan, *Phys. Rev. B*, **76**, 075131 (2007).
- [18] W-F. Tsai et al., *Nat. Commun.*, **4**, 1500 (2013).
- [19] S. Trivedi, A. Srivastava, and R. Kurchania, *J. Comput. Theor. Nanosci.*, **11**, 1-8 (2014).

- [20] B. van den Broek et al., *2D Materials*, **1**, 021004 (2014).
- [21] A. Feurence et al., *Phys. Rev. Lett.*, **108**, 245501 (2012).
- [22] C. C. Liu, H. Jiang and Y. Yao, *Phys. Rev. B*, **84**, 195430 (2011).
- [23] L. Fu and C. L. Kane, *Phys. Rev. B*, **76**, 045302 (2007).
- [24] X. L. Qi and S. C. Zhang, *Rev. Mod. Phys.*, **83**, 1057 (2011).
- [25] S. Q. Shen, *Topological Insulator: Dirac Equation in Condensed Matters* (Berlín: Springer) (2012).
- [26] C. L. Kane, E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.*, **95**, 226801 (2005).
- [27] B. Andrei Bernevig, Taylor L. Hughes, and Shou-Cheng Zhang, *Science*, **314**, 1757-1761 (2006).
- [28] D. Shin et al., *Proceedings of the National Academy of Sciences*, **116**, 4135-4140 (2019).
- [29] M. Ezawa, *New J. Phys.* **14**, 033003 (2013); M. Ezawa, *J. Phys. Soc. Jpn.* **84**, 121003 (2015).
- [30] P. Hohenberg y W. W. Kohn, *Phys. Rev.*, **136**, B864 (1964).
- [31] Ira N. Levine, *Química Cuántica (5ª Edición)*, Pearson Educación S. A., 554-571 (2001).
- [32] W. Kohn and L. J. Sham, *Phys. Rev.*, **140**, A1133 (1965).
- [33] Ángel Delgado Mora, *Apuntes de la asignatura: Física del Estado Sólido, Tema 4*, Universidad de Granada (2014).
- [34] Mervyn Roy, *Apuntes: The Tight Binding Method*, Universidad de Rutgers (2015).
<http://www.physics.rutgers.edu/~eandrei/chengdu/reading/tight-binding.pdf>
- [35] P.Y. Yu and M. Cardona, *Fundamentals of Semiconductors: Physics and Materials Properties (4ª edición)*, Springer (2005).
- [36] N. D. Drummond, V. Zólyomi, and V. I. Fal'ko, *Phys. Rev. B*, **85**, 075423 (2012).
- [37] L. Stille, C. J. Tabert y E. J. Nicol, *Phys. Rev. B*, **86** 195405 (2012); C. J. Tabert y E. J. Nicol, *Phys. Rev. Lett.*, **110**, 197402 (2013); *Phys. Rev. B*, **88**, 085434 (2013).
- [38] W-F. Tsai, C-Y. Huang, T-R Chang et al., *Nat. Commun.* **4**, 1500 (2013).
- [39] N. D. Drummond, V. Zólyomi, and V. I. Fal'ko, *Phys. Rev. B* **85**, 075423 (2012).
- [40] C. C. Liu, W. Feng, and Y. Yao, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 076802 (2011).

- [41] M. Tahir and U. Schwingenschlögl, *Scientific Reports*, **3**, 1075 (2013).
- [42] E. Romera and M. Calixto, *EPL*, **111**, 37006 (2015).
- [43] M. Calixto and E. Romera, *J. Stat. Mech.*, **2015**, P06029 (2015).
- [44] E. Romera and M. Calixto, *J. Phys. Condens. Mat.*, **27**, 175003 (2015).
- [45] M. Calixto and E. Romera, *EPL*, **109**, 40003 (2015).
- [46] P. Ledwith, W. J. M. Kort-Kamp, D. A. R. Dalvit, *Phys. Rev. B*, **97**, 165426 (2018).
- [47] M. Ezawa, *Phys. Rev. Lett.*, **110**, 026603 (2013).
- [48] E. Romera y F. de los Santos, *Phys. Rev. B*, **80**, 165416 (2009).
- [49] E. Romera, J. B. Roldán y F. de los Santos, *Phys. Letts.*, **378**, 2582-2585 (2014).
- [50] J.J. Torres and E. Romera, *Phys. Rev. B*, **82**, 155419 (2010).
- [51] T. García, N. A. Cordero, and E. Romera, *Phys. Rev. B*, **89**, 075416 (2014).
- [52] P. R. Zangara, Tesis Doctoral: El eco de Loschmidt en sistemas de espines: decoherencia, equilibración, localización y mecanismos emergentes de irreversibilidad, Universidad Nacional de Córdoba (2015).
- [53] E. Romera, M. Calixto and O. Castaños, *Phys. Scr.*, **89**, 095103 (2014).
- [54] A. Nagy and E. Romera, *Int. J. Quantum Chem.*, **109**, 2490-2494 (2009).
- [55] E. Romera, K. D. Sen and Á. Nagy, *J. Stat. Mech.*, **2011**, P09016 (2011).
- [56] A. N. Kolmogorov, *Probl. Peredachi Inf.*, **1**, 3-11 (1965).
- [57] R. López-Ruíz, H. L. Mancini and X. Calbet, *Phys. Lett. A*, **209**, 321-326, (1995).
- [58] R. A. Fisher, *Theory of Statistical Estimation*, *Proc. Cambridge Philos. Soc.*, **22**, 700-725 (1925).