

Topología oculta de la materia

Manuel Asorey

El hallazgo de la topología oculta en el espectro de energías de algunos materiales ha sido la clave para el descubrimiento de fases topológicas de la materia. Las novedosas propiedades conductoras de la materia en estas fases topológicas junto a la robustez que la topología les proporciona prometen aplicaciones interesantes de los materiales topológicos en espintrónica y computación cuántica. La topología, una vieja rama de las matemáticas, se ha convertido así, de forma inesperada, en una herramienta esencial para el análisis y clasificación de los nuevos materiales topológicos.

Introducción

Hace casi un siglo, el matemático alemán Hermann Weyl introdujo, aunque de forma imperfecta, el concepto de campo gauge [1]. Weyl, que realizó otras muchas contribuciones fundamentales a la física y matemáticas, está ahora de moda en los estudios de nuevas fases topológicas de la materia. El estudio de materiales topológicos conocidos como semimetales de Weyl, ha dado lugar en el último año y medio a más de medio millar de publicaciones [2][3].

Los semimetales de Weyl son los últimos miembros de una familia de materiales cuyas características más notables vienen determinadas por sus propiedades topológicas. Los aislantes topológicos, los superconductores topológicos y los semimetales de Dirac son algunos sus parientes.

La robustez frente a deformaciones o impurezas que proporciona el carácter topológico de sus estados cuánticos y la relevancia de los efectos de borde constituyen dos características fundamentales de los materiales topológicos. Ambas propiedades proporcionan la estabilidad que es fundamental para posibles aplicaciones en espintrónica y computación cuántica.

Durante muchos años, el Modelo Estándar de campos y partículas postuló que los neutrinos eran partículas de Weyl. Con el descubrimiento de la masa de los neutrinos esto cambió radicalmente y ya solamente queda por dilucidar si los neutrinos son partículas de tipo Dirac o Majorana. Curiosamente los fermiones de Weyl resurgen ahora como cuasipartículas en semimetales topológicos.

La transferencia de ideas entre la física de altas energías y de la materia condensada ha sido muy fructífera. El mecanismo de Higgs es un ejemplo de ese rico intercambio de ideas. Sugerido por Schwinger, desarrollado por Anderson y materializado por Brout, Englert y Higgs (BEH), el mecanismo de BEH constituye una de las piezas fundamentales del Modelo Estándar. En él, aunque las partículas fundamentales, quarks y leptones cargados, son inicialmente de tipo Weyl, por el mecanismo de BEH se vuelven masivas. En los semimetales dicho fenómeno no ocurre porque en ellos los fermiones de Weyl gozan de protección topológica.

Tradicionalmente la frontera entre altas y bajas energías coincidía con la frontera entre teorías relativistas y no relativistas. Sin embargo las propiedades conductoras de algu-

nos sólidos se describen de forma muy eficiente mediante el transporte de cuasi-partículas que se comportan como partículas relativistas. El grafeno es uno de esos materiales; la mayoría de materiales topológicos también.

Una vez traspasada esa frontera relativista los resultados conocidos de uno y otro campo se vuelven mutuamente transferibles. Sorprendentemente, resultados considerados como negativos de la física de altas energías dan lugar a efectos interesantes en la física de materia topológica. Por ejemplo, la imposibilidad de discretizar fermiones sin masa en un retículo mediante acoplos locales, sin réplicas, complica la regularización ultravioleta del Modelo Estándar [4]. Sin embargo los mismos resultados implican la aparición de réplicas de partículas sin masa en los bordes de los aislantes topológicos y en el interior de los semimetales topológicos, lo que da lugar a efectos interesantísimos.

Topología Cuántica

La Topología es la rama de las matemáticas que estudia las propiedades de los espacios que son invariantes bajo deformaciones continuas. La historia de la topología comienza con Leonard Euler y su famosa solución del problema de los puentes de Königsberg, que probó la imposibilidad de cruzarlos todos sin pasar más de una vez por alguno de ellos. Pero quizás más famosa es su fórmula $C-A+V=2$, que establece que la suma del número de vértices V y caras C menos el número de aristas A de un poliedro es siempre igual a 2. Este número $C-A+V$ es un invariante topológico de la esfera en la que se inscribe al poliedro y se conoce con el nombre de característica de Euler. En el caso de la esfera su valor es 2, pero en toro es 0. Por eso la misma suma $C-A+V$ se anula para poliedros inscritos en el toro (Figura 1). Una manera sencilla de distinguir espacios topológicos diferentes como el toro T^2 o la esfera S^2 es mostrando que poseen invariantes topológicos diferentes. En los espacios bidimensionales, la característica de Euler puede también expresarse como la integral de la curvatura escalar de cualquier métrica Riemanniana

$$\chi = \frac{1}{4\pi} \int \sqrt{g} R$$

Lo sorprendente es que el resultado no depende de la métrica del espacio. Es decir, para todas las métricas de la esfe-

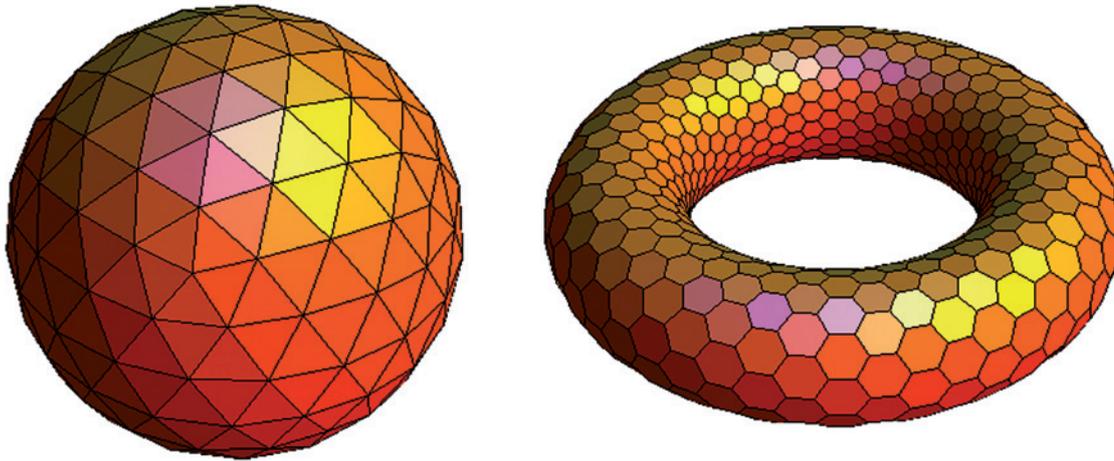


Fig. 1. Recubrimientos poliédricos con caras hexagonales y triangulares del toro y la esfera. En ambos casos se satisface la ley de Euler. Precisamente, la imposibilidad de recubrir la esfera con caras hexagonales es una consecuencia de dicha ley. Por eso los balones de fútbol y el fullereno incluyen algunas caras pentagonales.

ra por mucho que la deformen $\chi = 2$; y lo mismo ocurre para el toro, donde siempre $\chi = 0$. Intuitivamente sabemos que es imposible transformar un balón de fútbol en un flotador sin romperlo (Figura 1), pero el hecho de que sus invariantes topológicos sean diferentes proporciona un algoritmo inapelable para probarlo.

Aunque la irrupción de la topología como una herramienta fundamental para la física cuántica es un fenómeno reciente, el descubrimiento de su relevancia se remonta a los orígenes de la física cuántica, cuando Dirac analizó los efectos cuánticos de los monopolos magnéticos, y cuando Aharonov y Bohm pusieron de manifiesto la relevancia de los factores de fase magnéticos en los experimentos de las dos rendijas de Young con partículas cargadas. A partir de entonces la aparición de efectos topológicos se extiende por diversos campos de la física, con fenómenos como la transición de fase de Berezinski-Kosterlitz-Thouless en películas superconductoras o las anomalías gauge en la teorías cuántica de campos. Incluso en algún momento se llegó a conjeturar que la topología podría jugar un papel determinante en el mecanismo de confinamiento de los quarks.

La verdadera revolución topológica ha ocurrido recientemente con la aparición de nuevas fases de la materia que no están caracterizadas por parámetros de orden locales resultantes de un proceso de ruptura espontánea de una simetría, sino más bien por invariantes topológicos que tienen una dependencia global en los parámetros del sistema. Precisamente la Academia de Ciencias sueca ha galardonado el año pasado a los pioneros de esta revolución: David Thouless, Duncan Haldane y Michael Kosterlitz, con el Premio Nobel de Física de 2016 [5].

Los efectos cuánticos de la topología normalmente aparecen en fenómenos de bajas energías. Los modos de altas energías son insensibles tanto a la topología espacial como a las condiciones de contorno, mientras que ambos sí que afectan sensiblemente a los modos de energías más bajas. Sin embargo los efectos topológicos, que dan lugar

las nuevas fases de la materia, no están generados por la topología o condiciones de contorno de los diferentes materiales, sino por otra topología oculta en la estructura de bandas de su espectro de energías [6].

Teoría de bandas y estados de borde

En un sólido cristalino los niveles de energía de los electrones periféricos que se encuentran marginalmente vinculados a los átomos del sólido poseen un espectro de energías distribuido en bandas. En estado de equilibrio los electrones ocupan los niveles de energía más baja, hasta que llegan un nivel de energía máximo dado por el nivel de Fermi. Si éste se encuentra entre dos bandas, todos los electrones se encuentran en las bandas inferiores, y, si las excitaciones provocadas por un potencial externo no alcanzan para hacerlos saltar a la banda superior, el sólido es un material aislante eléctrico. Si el nivel de Fermi está inmerso en una banda espectral, el sólido es un metal. Los semiconductores son materiales en los que la separación entre las bandas es pequeña, con lo que el sistema puede tener comportamientos de aislante o conductor dependiendo de las perturbaciones externas.

En los aislantes topológicos la estructura de bandas posee características topológicas que dan lugar a efectos especiales. Por ejemplo, aunque desde el punto de vista de su estructura de bandas electrónicas serían aislantes, en realidad son conductores de espín a través de estados localizados en el borde del material que no pertenecen a las bandas. Usualmente la conducción a través del borde es posible en cualquier sólido, pero siempre es muy frágil. La conducción en dimensiones inferiores se obstruye fácilmente con la presencia de impurezas o deformaciones de la estructura del sólido, como muestra el fenómeno de localización de Anderson. Sin embargo en los aislantes topológicos las corrientes de borde están protegidas topológicamente y, a pesar de producirse en dimensiones inferiores, se mantienen incluso en presencia de impurezas y deformaciones del

borde, en analogía con la característica de Euler que es invariante por deformaciones del espacio.

Los estados de borde y la topología oculta en la estructura de bandas son las claves de comportamiento de los materiales topológicos.

Curiosamente, el fenómeno de conducción topológica marginal surgió en materiales bidimensionales con el descubrimiento del efecto Hall cuántico. El efecto Hall estándar consiste en el aumento de la resistencia de un metal plano cuando lo sometemos a la acción de un campo magnético transversal. El efecto cuántico se manifiesta en que el incremento de la resistencia transversal con el campo magnético, en lugar de ser linealmente continuo, se produce a saltos en múltiplos enteros de una unidad cuántica elemental e^2/h . En cierta medida el campo magnético ha transformado un metal bidimensional en uno unidimensional. El descubrimiento del carácter topológico de este efecto supuso el punto de arranque del campo de materiales topológicos.

El fenómeno también puede ocurrir sin necesidad de campo magnético siempre y cuando las interacciones espín-orbita de los átomos sean lo suficientemente intensas para reemplazar al campo magnético externo [7]. Este fenómeno, conocido como efecto Hall cuántico anómalo, abrió la puerta al descubrimiento de los aislantes topológicos. Si todas las interacciones electrónicas respetan la simetría por inversión temporal, como lo hace el propio acoplo espín-orbita, las corrientes de borde aparecen emparejadas; por cada una que circula en un sentido hay otra en el opuesto y los espines de ambas están polarizados en direcciones opuestas. Esto significa que aunque el balance de carga es nulo, el de espín no lo es. Los aislantes topológicos se diferencian de los ordinarios en que en ellos las parejas de corrientes de borde opuestas se mantienen para todos los valores de la energía entre bandas, mientras que en los ordinarios hay algún intervalo de energías en que no hay ninguna corriente de borde [8][9][10].

Topología oculta en el efecto Hall cuántico.

Al igual que los espacios topológicos las distintas fases topológicas de los aislantes bidimensionales pueden caracterizarse mediante invariantes topológicos. En el caso del efecto Hall cuántico entero, donde la interacción entre los electrones es despreciable, los electrones se propagan como ondas de Bloch a lo largo del aislante con todos los momentos contenidos en la zona de Brillouin del espacio recíproco. Esta zona puede identificarse en una red cristalina cuadrada con un toro T^2 . Los estados cuánticos de cada banda de energías inducen un campo gauge virtual (*campo de Berry*) sobre este toro con una unidad de carga magnética (*clase de Chern*) [11]

$$Q = \frac{1}{2\pi} \int_{T^2} \text{tr} F_{12} = 1$$

Si el nivel de Fermi se sitúa por encima de varias bandas, se debe sumar a todas ellas y en ese caso el invariante coincide con el número de bandas. Cuando el metal tiene dos bordes paralelos en una dirección y es infinitamente largo en la otra, además de las ondas de Bloch ordinarias aparecen otros estados con energías en la intermedia entre bandas y que están localizados en los bordes del metal. Estos son los famosos estados de borde ya mencionados anteriormente. La energía de estos estados de borde varía con el momento de Bloch paralelo al borde, interpolando de modo gradual entre cada banda y la siguiente. Por un resultado análogo al teorema del índice puede verse que al final de cada banda aparece un nuevo par de estados de borde circulando en el mismo sentido, debido a que la clase de Chern del campo gauge de la banda es $Q=1$. Por eso el número total de estados de borde es el doble del número de bandas. La duplicidad es debida a los dos modos de espín del electrón. Esta conexión entre el número de estados de borde y los invariantes topológicos del campo gauge del interior se conoce con el nombre de correspondencia interior-borde y es una característica destacada de las fases topológicas.

Aislantes topológicos

Pero hay otras fases topológicas distintas de la anterior, tales como la del efecto Hall cuántico de espín y los aislantes topológicos. En ellas no hay campo magnético externo pero si un acoplo espín-órbita que da lugar a efectos similares. En ambos casos, la clase de Chern se anula y, por lo tanto, podría no haber estados de borde como ocurre en los aislantes ordinarios o haberlos, en cuyo caso deben formar pares circulando en direcciones opuestas dando lugar a una clase de Chern nula. En los aislantes topológicos o el efecto Hall cuántico de espín, debido a que todos los acoplos electrónicos preservan la simetría por inversión temporal T , la zona de Brillouin efectiva es el cociente del toro T^2 , excluyendo los momentos de Bloch invariantes bajo reflexión temporal, por el grupo de simetrías Z_2 generado por T . En ese caso la clasificación de las distintos campos de gauge de Berry asociados a las bandas viene dada por el valor de su holonomía h (*fase de Berry*) en un contorno que rodee a todos esos puntos invariantes bajo inversión temporal. Esta fase, solo puede tomar los valores $h = \pm 1$ debido a la simetría T . En el caso $h = +1$ la fase corresponde a un aislante común y si $h = -1$, a un aislante topológico. Esta caracterización basada en los estados del grueso del aislante tiene su contrapartida en el comportamiento de los estados de borde del material (*dualidad interior-borde*). Por el teorema de Kramers todos los estados con momentos de Bloch invariantes por inversión temporal (que fueron excluidos en el análisis del interior) están degenerados. Esto afecta también a los estados de borde. Por lo

tanto los estados de borde que interpolan adiabáticamente entre dos bandas contiguas se cruzan a pares en los puntos de Kramers donde el campo de gauge de Berry es singular.

Si el número de puntos de cruce entre bandas es par, tenemos un aislante normal, mientras que, si es impar, un aislante topológico. La paridad de los cruces es un invariante topológico, que está relacionado con el de la fase de Berry del interior del aislante. En el caso impar, hay parejas de estados de borde para todos los valores de la energía en la región entre bandas, mientras que, en el caso par, eso puede no ocurrir para algún rango de energías.

El cruce de niveles, que está garantizado en los puntos invariantes bajo T , explica la gran conductividad superficial del aislante topológico y es precisamente este carácter topológico lo que garantiza su estabilidad y robustez frente a perturbaciones, siempre que mantengan la invariancia bajo reflexión temporal.

Algo similar le ocurre a los aislantes topológicos tridimensionales. Sus tipos se clasifican mediante cuatro invariantes topológicos. Tres de ellos están caracterizados por los invariantes de sus proyecciones bidimensionales en sus bordes espaciales y el cuarto por el valor del término de Chern-Simons del campo gauge de Berry que debido a la invariancia T solo puede ser 0 o π . Aquellos materiales en los que este cuarto invariante es π se denominan aislantes topológicos fuertes y, cuando se anula, aislantes topológicos débiles. En ambos casos el espectro de energías de los estados de borde contiene fermiones de Dirac sin masa, lo que explica la gran conductividad superficial.

Semimetales topológicos

En los semimetales, a diferencia de los aislantes, las bandas de Bloch se besan para algunos valores de los momentos de Bloch. Por lo tanto, genéricamente son conductores, pero si los contactos son tenues pueden desaparecer ante cualquier perturbación dando lugar a un semiconductor. Sin embargo, en los semimetales topológicos eso no ocurre pues están protegidos topológicamente. Los niveles de energía muy cercanos a esos puntos de contacto de las bandas se sitúan en un cono característico de una relación de dispersión relativista. De manera efectiva el comportamiento de los electrones para energías cercanas a cada punto de contacto es similar al de un fermión relativista sin masa. Como es conocido hay tres tipos de fermiones sin masa que llevan los nombres de tres físicos ilustres: Dirac, Weyl y Majorana. De la misma forma habrá semimetales de Dirac, Weyl o Majorana.

El mismo fenómeno ocurre para estados de borde en los aislantes topológicos, lo que explica su conductividad. El borde de un aislante topológico se comporta como un semimetal de Dirac robusto puesto que está protegido fren-

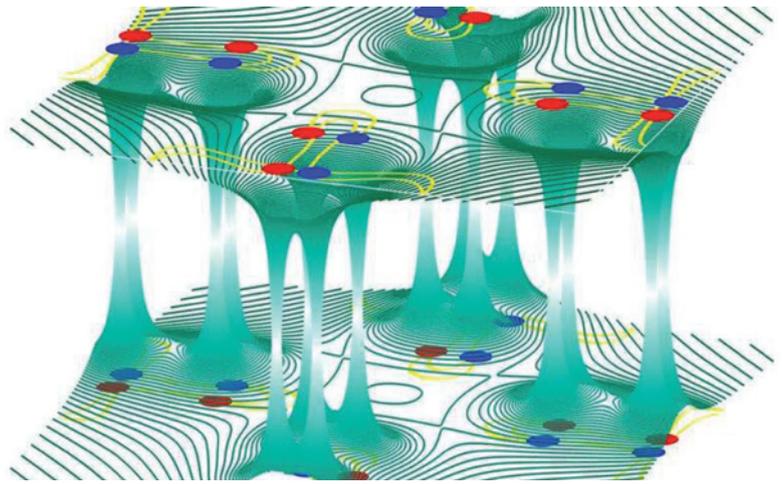


Fig. 2. Esquema simplificado del comportamiento de las bandas en un semimetal de Weyl. Los contactos entre las bandas ocurren en los vértices de los conos. En la proyección al borde superior se aprecian, en amarillo, los arcos de Fermi, que conectan las proyecciones de dos fermiones de Weyl con quiralidades opuestas.

te a perturbaciones que conserven la inversión temporal. Cada fermión de Dirac sin masa está compuesto por dos fermiones de Weyl de quiralidades opuestas¹. Ambos aparecen como cuasipartículas efectivas cuando el nivel de Fermi del semimetal se sitúa en un punto de contacto del semimetal. El teorema de Nielsen-Ninomiya [12] asegura que los conos con fermiones de Weyl en los semimetales nunca pueden aparecer solos, deben aparecer siempre en parejas con quiralidades opuestas. La demostración del teorema es de carácter topológico. Cuando el semimetal conserva la simetría T , las parejas fermiones de Weyl aparecen en el mismo punto de la zona de Brillouin dando lugar a un fermión de Dirac. Sin embargo, con interacciones que rompen la simetría de inversión temporal, los fermiones de tipo Weyl pueden aparecer en puntos diferentes. Esto es lo que ocurre en el caso de los semimetales de tipo Weyl, donde la anomalía quiral permite fermiones de Weyl localizados en puntos distintos de la zona de Brillouin [12].

En los semimetales topológicos de Weyl los estados de borde de cada cara del semimetal describen una superficie envolvente de la proyección a la zona de Brillouin de esa cara de los conos de los puntos de contacto. En el caso de semimetales de Weyl puede verse que dichas envolventes son superficies de Riemann helicoidales cuya orientación depende del sentido de la quiralidad. La intersección de la superficie de Fermi con la superficie helicoidal de los estados de borde asociados a la proyección de dos conos de Weyl de quiralidad opuesta, describe una curva en la zona de Brillouin de la cara del semimetal.

Esa curva que conecta las proyecciones de los vértices de esos conos se denomina arco de Fermi y es una de las señas de identidad de los semimetales de Weyl. Una curva similar también puede aparecer ocasionalmente en los semimetales de

¹ La quiralidad es una magnitud dicotómica con valores ± 1 que está relacionada con la proyección del espín en la dirección de propagación.

Dirac, pero en este caso la curva no es estable frente a perturbaciones. Por el contrario, en los semimetales de tipo Weyl por los mismos argumentos topológicos que conducen al teorema de Nielsen-Ninomiya, dicho arco es robusto frente a dichas perturbaciones.

La gran actividad actual en la búsqueda de nuevos semimetales está impulsada en el desarrollo de una nueva técnica espectroscópica conocida como ARPES (Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy) que permite conocer la energía y momento de Bloch de los electrones de la superficie de los semimetales con gran precisión y, por tanto, su relación de dispersión.

La investigación en semimetales de Weyl y nuevas fases topológicas de la materia se encuentra actualmente en un momento álgido, espoleada por el interés de sus posibles aplicaciones en espintrónica y computación cuántica.

Los ingredientes básicos que dan lugar a los sólidos topológicos: aparición de estados de borde y estructura topológica no trivial de las bandas de energía, pueden darse en muchos otros materiales de características muy diversas. Así han surgido los superconductores topológicos, dispositivos mecánicos y acústicos topológicos, cristales topológicos y los fluidos topológicos; y la búsqueda de nuevos materiales topológicos se encuentra sólo en su albor.

A comienzos de los años 1960 George Gamow escribió en un libro popular [13] que finalizaba con un comentario muy sugerente acerca de la gran efectividad de la matemática pura en la física: “En sus esfuerzos por resolver los enigmas de la Naturaleza los físicos suelen buscar el auxilio de la matemática pura y en muchos casos lo han conseguido[...] Únicamente la teoría de números y la topología (analysis situs) siguen siendo disciplinas puramente matemáticas sin ninguna aplicación a la física. ¿No podría ser que tengamos que recurrir a ellas para una mayor comprensión de los enigmas de la Naturaleza”.

Dado el éxito, que ni el mismo Gamow podía imaginar, de su predicción *topológica*, cabría especular con la posibilidad de que con la teoría de números ocurra algo similar. Y aunque en sistemas cuánticos sencillos ya existe alguna aplicación interesante, el gran reto consiste en probar la hipótesis de Riemann mediante la Física Cuántica. El desafío ha sobrevivido a los más audaces intentos hasta el presente, pero el futuro no está escrito, lo que permite soñar.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por los proyectos FPA2015-65745-P del MINECO/FEDER y 2015-E24/2 de DGA-FSE.

Bibliografía

- [1] HERMANN WEYL, *Raum, Zeit, Materie* (Springer, 1918) y ediciones sucesivas. Traducción al inglés: *Space, Time and Matter* (Dover, 1999)
- [2] SHUANG JIA, SU-YANG XU y M. ZAHID HASAN, “Weyl semimetals, Fermi arcs and chiral anomalies”, *Nature Materials* **15**, 1140–1144, 2016 y sus referencias.
- [3] ADOLFO G. GRUSHIN, “Algo más que sociología de electrones: semi-metales topológicos de Weyl”, *Revista de Física*, 30-4, 10-14, 2016.
- [4] HOLGER B. NIELSEN y MATSAO NINOMIYA, “Absence of neutrinos on a lattice: (I). Proof by homotopy theory”, *Nuclear Physics B*, **185**, 20-40, 1981.
- [5] MIGUEL ÁNGEL MARTÍN-DELGADO, “La fusión de la física cuántica y la topología produce nuevos estados de la materia”, *Revista de Física*, 30-4, 4, 2016.
- [6] MANUEL ASOREY, “Space, Matter and Topology”, *Nature Physics* **12**, 616–618 (2016).
- [7] F. DUNCAN M. HALDANE, “Model for a quantum Hall effect without Landau levels: Condensed-matter realization of the parity anomaly”, *Phys. Rev. Lett.* **61** 2015-2018, 1988.
- [8] M. ZAHID HASAN y CHARLES L. KANE, “Colloquium: topological insulators”, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 3045–3067, 2010.
- [9] XIAO-LIANG QI y SHOU-CHENG ZHANG, “Topological insulators and superconductors”, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1057–1110, 2011.
- [10] B. ANDREI BERNEVIG y TAYLOR. L. HUGHES, *Topological insulators and topological superconductors* (Princeton U. Press, 2013).
- [11] DAVID J. THOULESS, MAHITO KOHMOTO, M. PETER NIGHTINGALE y MARCEL P. M. DEN NIJS, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 405–408, 1982.
- [12] HOLGER B. NIELSEN y MATSAO NINOMIYA, “The Adler-Bell-Jackiw anomaly and Weyl fermions in a crystal”, *Phys. Lett.* **130B**, 389–396, 1983.
- [13] GEORGE GAMOW, *Biography of Physics* (Dover, 1961). Traducción al castellano: *Biografía de la Física* (Alianza Editorial, 2001).



Manuel Asorey
Departamento de Física Teórica
Universidad de Zaragoza