



**Polaritones Topológicos en una dimensión: una perspectiva teórica desde la matriz de transferencia**

**Autor:**

---

Javier Andrés Rojas Sánchez (Matrícula: 2193011702)

**Co-asesor:**

---

Dr. Arturo Camacho Guardian

**Co-asesor:**

---

Dr. Miguel Angel Bastarrachea Magnani

PROYECTO TERMINAL I: INVESTIGACIÓN TEÓRICA  
CLAVE 2111107. TRIMESTRE 23-I.

**Licenciatura en Física**  
**Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa**

19 de Junio 2023

---

## **Resumen**

En el presente trabajo se estudian las propiedades de *polaritones* (cuasipartículas resultantes del acoplamiento fuerte luz-materia) que surgen en un arreglo de 20 nano-cavidades fuertemente acopladas a moléculas orgánicas que pueden presentar dos configuraciones distintas. Para esto se emplean dos formalismos distintos; el primero está basado en la electrodinámica clásica y se le conoce como *Matriz de transferencia* mientras que el segundo es un modelo de amarre fuerte en una dimensión, el modelo *SSH*. Mediante este enfoque dual es posible explicar todas las propiedades del sistema y junto con ello se exhiben las propiedades topológicas del mismo.

**Palabras clave:** *nano-cavidades; acoplamiento luz-materia; excitones-polaritones; Modelo SSH; Matriz de transferencia*

## Índice

<b>1. Introducción</b>	<b>3</b>
<b>2. Breve repaso sobre las ecuaciones de Maxwell, ondas electromagnéticas</b>	<b>8</b>
<b>3. Formalismo de matriz de transferencia</b>	<b>10</b>
<b>4. Sistema</b>	<b>18</b>
<b>5. Implementación numérica</b>	<b>22</b>
<b>6. Formalismo de segunda cuantización</b>	<b>25</b>
<b>7. Polaritones</b>	<b>30</b>
<b>8. Modelo SSH</b>	<b>36</b>
<b>9. Topología del modelo SSH</b>	<b>47</b>
<b>10. Polarización del modelo SSH</b>	<b>55</b>
<b>11. Discusión de resultados y conclusiones</b>	<b>58</b>

## 1. Introducción

Algunas de las propiedades de los sistemas físicos pueden ser explicadas mediante modelos matemáticos que involucran la existencia de partículas independientes, en otras palabras, se puede asumir que estas se "ignoran" unas a otras y, de una forma inesperada, esto da buenos resultados. Sin embargo hay otras numerosas propiedades más que surgen de la interacción de muchas partículas y, como es de intuirse, su estudio es más difícil debido a la complejidad con la que se presenta este fenómeno.

Algunos ejemplos de lo anterior podrían ser átomos en un sólido, moléculas en un líquido o los protones y neutrones en el núcleo de los átomos. Entonces es pertinente puntualizar el hecho de que para entender por completo las características de un sistema físico real (el cual está formado por una colección de partículas interactuando entre sí) es necesario tratar con el *problema de muchos cuerpos*.

Desde luego que intentar encontrar y resolver las ecuaciones de movimiento de todas las partículas es una tarea que conlleva una dificultad alta, a pesar de ello, con el pasar de los años se fueron empleando nuevas herramientas matemáticas y nuevas ideas lo cual llevo a resultados satisfactorios. Y es que los sistemas de muchos cuerpos pueden ser descritos como si estuvieran compuestos de excitaciones colectivas que son independientes entre sí [1]; entonces en lugar de estudiar al colectivo de partículas interactuando se estudia el comportamiento de objetos virtuales que son independientes uno del otro, es decir, en lugar de estudiar partículas se estudian *cuasipartículas*

Una forma intuitiva de concebir el concepto de *cuasipartícula* es pensar en primer lugar en una partícula real que al moverse en un sistema necesariamente tendrá que influir en el movimiento de las demás partículas del medio pues las empujará o será empujada por ellas. Si se visualiza este escenario "desde lejos" sólo será posible ver una especie de nube formada por todos los movimientos de las demás partículas rodeando a la partícula inicial, entonces este primer ejemplo describe una *cuasipartícula* formada por una partícula inicial y la nube que la rodea.

En general, una descripción sencilla de *cuasipartícula* es [1]:

$$\text{Cuasipartícula} = \begin{matrix} \text{partícula} \\ \text{simple} \end{matrix} + \begin{matrix} \text{nube o} \\ \text{vestimenta} \end{matrix} \quad (1.1)$$

Como consecuencia del cómo se piensa en las *cuasipartículas* estas tienen algunas características que las partículas reales no poseen como lo son la *masa efectiva* y la *vida media*.

El concepto de *cuasipartícula* es uno de los más importantes en el área de materia condensada de la física moderna pues con ello es posible englobar una serie de excitaciones o procesos que ocurren en un sistema para posteriormente tratarlas como una partícula libre, lo cual simplifica enormemente los cálculos matemáticos.

Es importante señalar que las cuasipartículas no se limitan a aparecer solamente a partir de partículas reales, sino que es posible que estas surgan desde interacciones de otras cuasipartículas, como es el caso de la que se estudia en el presente escrito; el *polaritón*. Sin embargo, antes de ello es pertinente definir sus componentes; los *fotones* y los *excitones*.

De acuerdo a la teoría cuántica, los *fotones* son las partículas que componen todas las formas de radiación electromagnética pues su energía es directamente proporcional a la frecuencia de la onda  $E = h\nu$ , una consecuencia de esto es que no poseen masa.

Un *excitón* es básicamente un estado ligado entre un electrón y su "hueco", este último se produce cuando, en un material semiconductor, se excita al electrón y se le "arranca" de su lugar, pese a esto, estas dos entidades se mantienen relacionadas mediante atracción coulombiana. Se tienen dos tipos de excitones; los de *Wannier* y los de *Frenkel* [2].

Los excitones de *Wannier* son aquellos que se encuentran débilmente ligados, entonces algunas de sus propiedades son; la distancia entre el par electrón-hueco se extiende a lo largo de varias celdas de la red cristalina en la que se encuentran (algunos nanómetros) y su energía de enlace es pequeña ( $\sim 10 - 60 meV$ ). Esta cuasipartícula aparece regularmente en materiales inorgánicos [2].

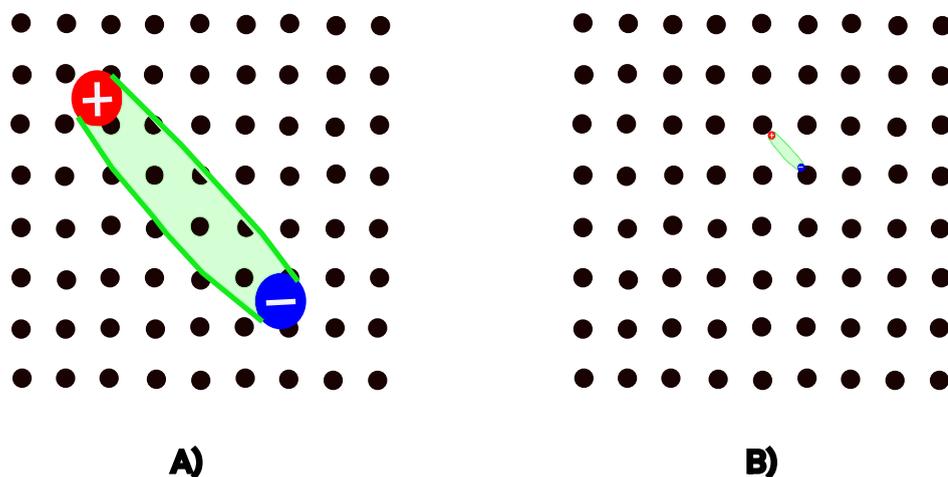


Figura 1: A) Representación simplificada de un excitón de Wannier B) Representación simplificada de un excitón de Frenkel.

Respecto a los excitones de *Frenkel*, estos están fuertemente ligados y por ende presentan las siguientes propiedades; la distancia entre el par es mucho más pequeña de forma tal que generalmente no exceden el tamaño de una celda de la red (distancias moleculares) y la energía de enlace es alta ( $\sim 0.1 - 1eV$ ). Usualmente se asocian a materiales orgánicos.

Ya que se han introducido estas dos entidades, ahora llamamos *polaritón* a la cuasipartícula formada por un excitón (en este caso de *Frenkel*) y un fotón, es decir:

$$Polaritón = \underset{Frenkel}{Excitón\ de} + Fotón \quad (1.2)$$

De una forma simplificada, al excitar moléculas de materia con luz aparece un excitón, ya que este tiene un tiempo de vida finito, al desaparecer liberará un fotón. Sin embargo, si este proceso se da dentro de una cavidad óptica entonces es posible absorber al fotón y que este vuelva a crear al excitón reiniciando el ciclo de excitaciones, esta serie de procesos da lugar a la aparición de los polaritones.

De acuerdo a lo descrito hasta el momento, al hacer interactuar luz y materia mediante el fotón y el excitón se pueden encontrar dos regímenes; uno en el cual el acoplamiento es débil y otro que es fuerte. El primero sólo tiene como efecto la modificación del patrón de emisión del modo de la cavidad, mientras que el segundo lleva a dos nuevos estados propios [3], es claro que estos acoplamientos están relacionados con la "eficacia" de la cavidad que captura al fotón y las transiciones moleculares que generan al excitón.

Considérese que la cavidad deja salir al fotón con una tasa de  $\Gamma$  mientras que el electrón va del estado excitado al estado fundamental con una tasa de decaimiento  $\kappa$ , el acoplamiento débil se da cuando estas dos cantidades son mayores al acoplamiento entre ambos sistemas;  $\Gamma, \kappa > \Omega$

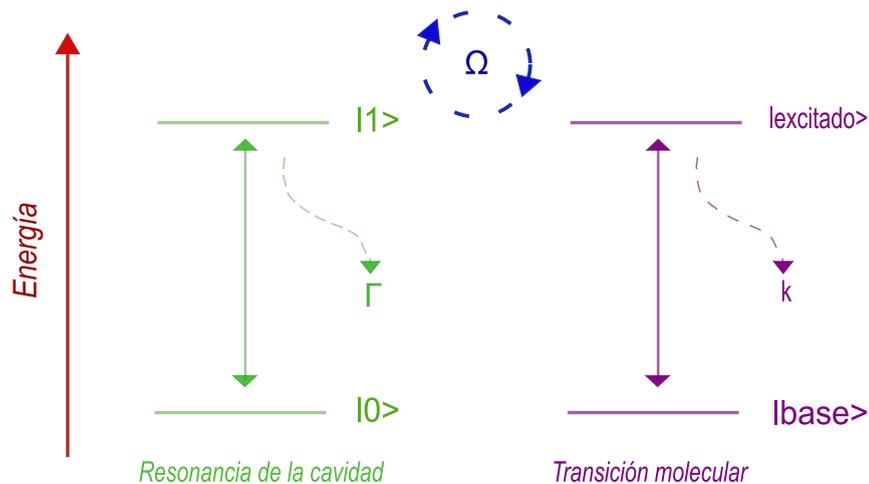


Figura 2: Acoplamiento débil,  $\Gamma, \kappa > \Omega$

El acoplamiento fuerte aparece cuando  $\Gamma, \kappa < \Omega$ , lo que conlleva a la aparición de dos nuevos niveles de energía correspondientes a los polaritones.

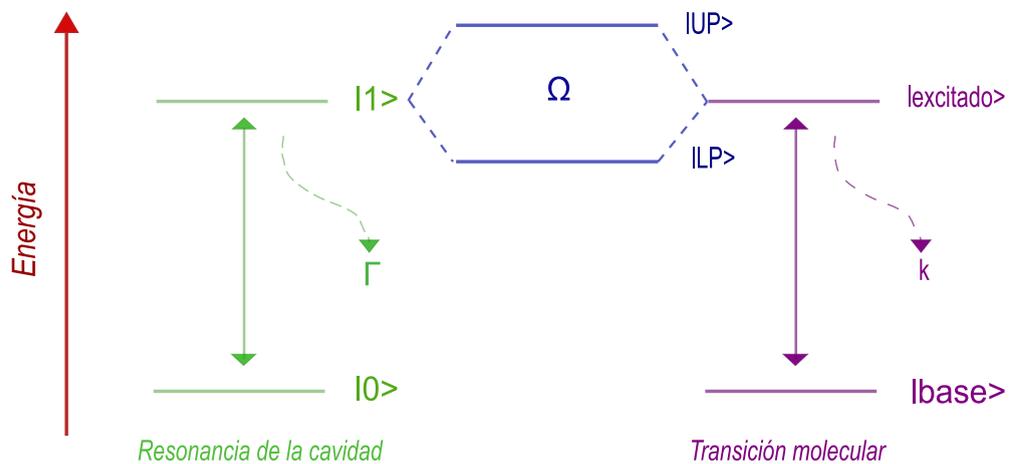


Figura 3: Acoplamiento fuerte,  $\Gamma, \kappa < \Omega$

Entonces, para que los polaritones puedan aparecer, es necesario lograr condiciones donde haya un acoplamiento fuerte de luz-materia, es decir, se debe tener una cavidad que logre atrapar al fotón durante un tiempo considerable y una molécula que logre dar excitaciones constantes entre sus niveles de energía.

Un sistema que es capaz de cubrir tales requisitos es una *cavidad de Fabry-Perot* cargada de moléculas orgánicas. Este es un arreglo que consiste en dos superficies reflejantes, planas y paralelas que se encuentran a una distancia lo suficientemente pequeña como para que sólo algunas longitudes de onda de la radiación incidente queden atrapadas. En la figura se presenta una simplificación de lo anterior.

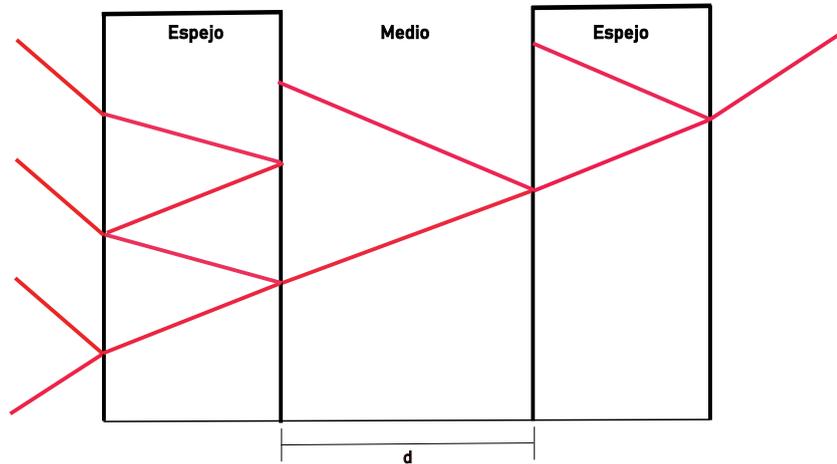


Figura 4: Simplificación de cavidad de Fabry-Perot. La línea roja representa la luz incidente mientras que  $d$  es la distancia entre las placas paralelas. En el dibujo se aprecian procesos de reflexión (cuando el rayo "rebota" en los espejos) y procesos de transmisión (cuando el rayo "sale" de la cavidad).

En particular, los sistemas que se estudiarán es el presente escrito consisten en cadenas de cavidades (las especificaciones se indicarán más adelante, en la sección 4) rellenas de una molécula orgánica. Para ello, se emplearán dos formalismos; el primero está basado en la electrodinámica clásica y se le conoce como *matriz de transferencia* que es una simple pero poderosa herramienta para visualizar la interacción de la radiación con el arreglo de cavidades, el segundo es un modelo de amarre fuerte conocido como *SSH (Su-Schrieffer-Heeger)* el cual tiene como fundamento la mecánica cuántica, este describe la interacción entre fotones y excitones en el arreglo de cavidades.

## 2. Breve repaso sobre las ecuaciones de Maxwell, ondas electromagnéticas

*Propagación de campos electromagnéticos en un medio*

Considérense las ecuaciones de Maxwell en un medio dieléctrico en el cual no hay fuentes de campo [4]:

*Leyes de Gauss*

$$\nabla \cdot \vec{D} = 0. \quad (2.1)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0. \quad (2.2)$$

*Ley de Faraday*

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}. \quad (2.3)$$

*Ley de Ampère-Maxwell*

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}. \quad (2.4)$$

Es útil recordar que, en un medio lineal, el vector de desplazamiento eléctrico está definido como  $\vec{D} \equiv \epsilon \vec{E}$ , y que análogamente para el caso magnético se tiene  $\vec{H} = \frac{1}{\mu} \vec{B}$ . Se han asumido a  $\epsilon$  y  $\mu$  como constantes.

Ahora, aplicando el rotacional a la ecuación 2.3 se obtiene:

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{E}) = -\frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times \vec{B}). \quad (2.5)$$

De acuerdo a la identidad vectorial:  $\vec{A} \times (\vec{B} \times \vec{C}) = \vec{B} (\vec{A} \cdot \vec{C}) - \vec{C} (\vec{A} \cdot \vec{B})$ , se reescribe la ecuación anterior como:

$$\nabla (\nabla \cdot \vec{E}) - \nabla^2 \vec{E} = -\frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times \vec{B}). \quad (2.6)$$

$$\frac{1}{\epsilon} \nabla (\nabla \cdot \vec{D}) - \nabla^2 \vec{E} = -\mu \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times \vec{H}). \quad (2.7)$$

Sustituyendo las leyes de Gauss y Ampère-Maxwell:

$$-\nabla^2 \vec{E} = -\mu \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \right), \quad (2.8)$$

$$\nabla^2 \vec{E} = \mu \epsilon \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}. \quad (2.9)$$

Nótese que esta ecuación describe un movimiento ondulatorio, es decir, el campo eléctrico se propaga a través del medio como una onda que tiene una velocidad constante  $v = \frac{1}{\sqrt{\mu\epsilon}}$ . Mediante un procedimiento completamente análogo se puede obtener que el campo magnético también se propaga como una onda:

$$\nabla^2 \vec{B} = \mu\epsilon \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2}. \quad (2.10)$$

Las soluciones a las ecuaciones anteriores pueden ser escritas como funciones sinusoidales o de forma equivalente en términos de una exponencial compleja:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = E_0 e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} \hat{n}. \quad (2.11)$$

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = B_0 e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} \hat{l}. \quad (2.12)$$

Estas expresiones 2.11 y 2.12 entonces describen ondas electromagnéticas que se propagan en un medio infinito. Donde  $E_0$  y  $B_0$  son las amplitudes de los campos,  $\omega$  la frecuencia angular,  $\vec{k}$  el vector de onda y  $\hat{n}/\hat{l}$  indican la dirección en la que se propaga el campo.

### 3. Formalismo de matriz de transferencia

Para ilustrar la deducción del *método de matriz de transferencia* [5] se considera un arreglo de tres capas homogéneas, es decir, habrá tres medios con índices de refracción  $n_1, n_2, n_3$  a través de los cuales viajará una onda electromagnética como se muestra en la figura siguiente:

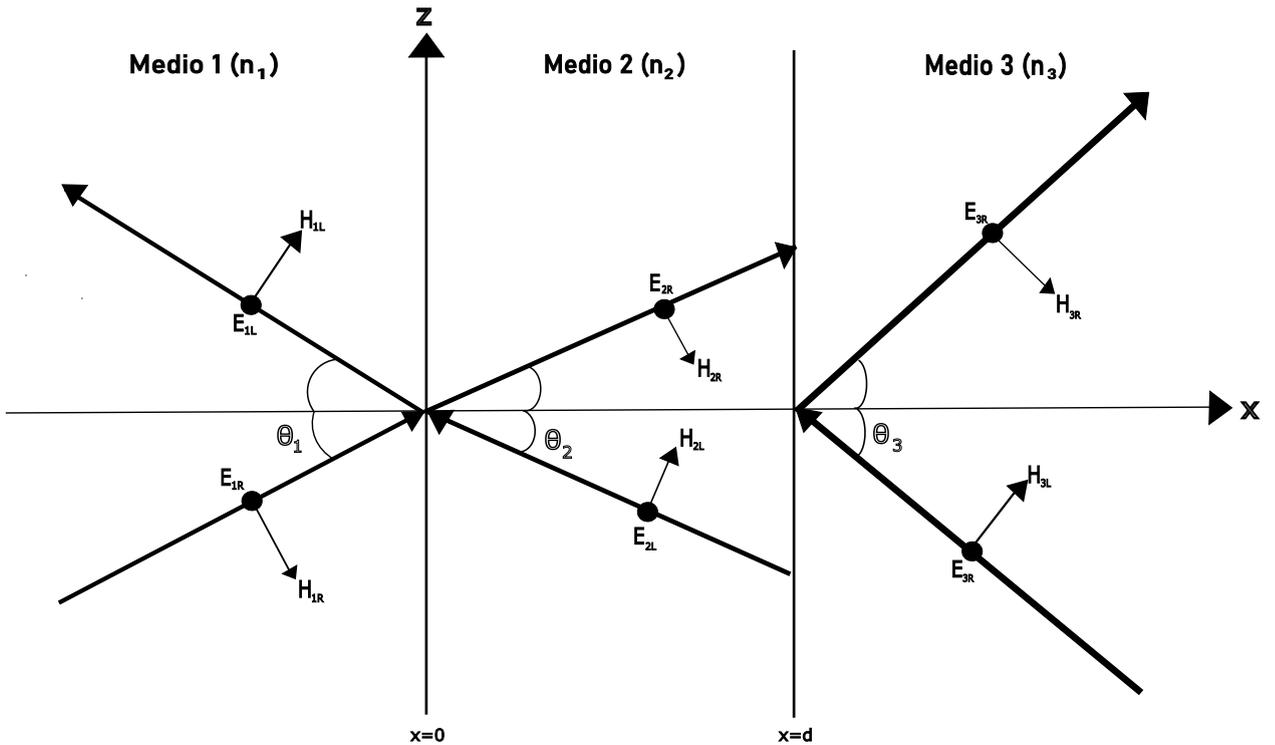


Figura 5: Propagación de una onda electromagnética a través de tres medios con índices de refracción  $n_1, n_2$  y  $n_3$ . Adicional a la dirección de la onda se muestran los campos  $\vec{H}_{i,R/L}$  y  $\vec{E}_{i,R/L}$  donde  $R$  señala el campo de la onda que va hacia la derecha y  $L$  el campo de la onda que va hacia la izquierda.

Debido a que los efectos magnéticos son despreciables (pues los materiales empleados son diamagnéticos) a partir de este punto todo se escribirá en términos de la amplitud del campo eléctrico. Ahora, de acuerdo a la configuración de los ejes, el vector de onda será  $\vec{k} = k_x \hat{x} + k_z \hat{z}$ , y entonces el campo eléctrico se escribe como:

$$\vec{E}(x, z, t) = E_0 e^{i(\omega t - k_x x - k_z z)} \hat{n}. \quad (3.1)$$

Cuya magnitud es:

$$|\vec{E}(x, z, t)| = E(x) \quad (3.2)$$

La parte del campo eléctrico que depende de  $x$  se puede visualizar como una combinación lineal de dos ondas; una que viaja a la derecha y otra que viaja a la izquierda, es decir:

$$E(x) = Re^{-ik_x x} + Le^{ik_x x}. \quad (3.3)$$

Nótese que el campo eléctrico sólo variará en función de la coordenada horizontal ya que el índice de refracción de las capas satisface  $\frac{\partial n}{\partial z} = 0$ . De acuerdo a las condiciones a la frontera, el cambio de medio entre la primer y segunda capa debe satisfacer las relaciones siguientes:

$$H_1^{\parallel} = H_2^{\parallel}, \quad (3.4)$$

$$E_1^{\parallel} = E_2^{\parallel}. \quad (3.5)$$

Según la figura 5, las componentes paralelas a la frontera del vector  $\vec{H}$  corresponden a la dirección  $z$  y las del vector  $\vec{E}$  a la dirección  $y$ , en términos de los ángulos  $\theta_1$  y  $\theta_2$  se escriben:

$$H_1^{\parallel} = -H_{1R} \cos \theta_1 + H_{1L} \cos \theta_1, \quad (3.6)$$

$$H_{2z}^{\parallel} = -H_{2R} \cos \theta_2 + H_{2L} \cos \theta_2, \quad (3.7)$$

$$E_1^{\parallel} = E_{1R} + E_{1L}, \quad (3.8)$$

$$E_2^{\parallel} = E_{2R} + E_{2L}. \quad (3.9)$$

Se reescribe la ecuación 3.4 como:

$$(H_{1R} - H_{1L}) \cos \theta_1 = (H_{2R} - H_{2L}) \cos \theta_2. \quad (3.10)$$

La relación entre las amplitudes de los campos eléctrico y magnético es  $|\vec{B}| = \frac{|\vec{E}|}{v}$ , y de acuerdo a la definición del vector  $\vec{H}$  es posible expresar todo en términos del campo eléctrico:

$$\vec{H} = \frac{\vec{E}}{\mu v} \iff \vec{H} = \sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}} \vec{E}, \quad (3.11)$$

$$\sqrt{\frac{\epsilon_1}{\mu_1}}(E_{1R} - E_{1L}) \cos \theta_1 = \sqrt{\frac{\epsilon_2}{\mu_2}}(E_{2R} - E_{2L}) \cos \theta_2. \quad (3.12)$$

Reescribiendo la ecuación 3.5 se tiene:

$$E_{1R} + E_{1L} = E_{2R} + E_{2L}. \quad (3.13)$$

Hay que advertir el hecho de que estas últimas ecuaciones (3.12 y 3.13) se pueden escribir de forma matricial:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \sqrt{\frac{\epsilon_1}{\mu_1}} \cos \theta_1 & -\sqrt{\frac{\epsilon_1}{\mu_1}} \cos \theta_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{1R} \\ E_{1L} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \sqrt{\frac{\epsilon_2}{\mu_2}} \cos \theta_2 & -\sqrt{\frac{\epsilon_2}{\mu_2}} \cos \theta_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{2R} \\ E_{2L} \end{pmatrix}. \quad (3.14)$$

Es conveniente dar nombre a la matriz de coeficientes que tiene la información del ángulo de incidencia y las constantes  $\epsilon$  y  $\mu$  del material, se define la *matriz dinámica* como:

$$\mathcal{D}_{i,s} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \sqrt{\frac{\epsilon_i}{\mu_i}} \cos \theta_i & -\sqrt{\frac{\epsilon_i}{\mu_i}} \cos \theta_i \end{pmatrix}. \quad (3.15)$$

El subíndice  $i$  indica el número de capa mientras  $s$  señala la polarización de la onda electromagnética la cual se puede ver en la figura 5 es decir, el campo eléctrico es normal al plano de incidencia. Cabe mencionar que es posible realizar un estudio similar y llegar a expresiones para una polarización  $p$  donde el campo magnético es normal al plano de incidencia.

Ahora se considera lo que sucede cuando la onda electromagnética viaja a través de la capa 2, ya que no se está cambiando de medio de transmisión no es posible emplear las condiciones de frontera, sin embargo, hay que percatarse de que en los valores de  $x = 0$  y  $x = d$  el campo eléctrico toma las formas:

$$E(x = 0) = E_{2R}e^{-ik_x(0)} + E_{2L}e^{ik_x(0)} = E_{2R} + E_{2L}, \quad (3.16)$$

$$E(x = d) = E_{2R}e^{-ik_x d} + E_{2L}e^{ik_x d} = E'_{2R} + E'_{2L}. \quad (3.17)$$

El campo eléctrico debe ser continuo, entonces se debe cumplir que:

$$E'_{2R} = e^{ik_x d} E_{2R}, \quad (3.18)$$

$$E'_{2L} = e^{-ik_x d} E_{2L}. \quad (3.19)$$

Nuevamente es posible escribir matricialmente estas dos ecuaciones:

$$\begin{pmatrix} E'_{2R} \\ E'_{2L} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\phi_2} & 0 \\ 0 & e^{-i\phi_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{2R} \\ E_{2L} \end{pmatrix}. \quad (3.20)$$

Donde  $\phi \equiv k_x d$  es el camino óptico en el medio 2, ahora se define a la *matriz de propagación* como:

$$\mathcal{P}_{i,s} = \begin{pmatrix} e^{i\phi_i} & 0 \\ 0 & e^{-i\phi_i} \end{pmatrix}. \quad (3.21)$$

Hay que señalar el hecho que la *matriz dinámica* contiene información acerca del cambio de medio en el que se mueve la onda y la *matriz de propagación* tiene información acerca del camino óptico que recorre la misma en una capa.

Es importante mencionar que cuando se tiene una polarización  $p$  se puede hacer un álgebra totalmente análoga y la *matriz dinámica* presentará algunos cambios en sus elementos:

$$\mathcal{D}_{i,p} \equiv \begin{pmatrix} \cos \theta_i & \cos \theta_i \\ \sqrt{\frac{\epsilon_i}{\mu_i}} & -\sqrt{\frac{\epsilon_i}{\mu_i}} \end{pmatrix}. \quad (3.22)$$

La *matriz de propagación* no presentará cambio alguno.

Es fácil notar que si se hace el mismo análisis a la frontera del segundo medio con el tercero se encontrará que las relaciones entre las amplitudes de los campos eléctricos se pueden escribir en términos de las matrices  $\mathcal{P}$  y  $\mathcal{D}$  de la siguiente forma:

$$\begin{pmatrix} E_{1R} \\ E_{1L} \end{pmatrix} = \mathcal{D}_1^{-1} \mathcal{D}_2 \begin{pmatrix} E_{2R} \\ E_{2L} \end{pmatrix}, \quad (3.23)$$

$$\begin{pmatrix} E_{2R} \\ E_{2L} \end{pmatrix} = \mathcal{P}_2 \begin{pmatrix} E'_{2R} \\ E'_{2L} \end{pmatrix}, \quad (3.24)$$

$$\begin{pmatrix} E'_{2R} \\ E'_{2L} \end{pmatrix} = \mathcal{D}_2^{-1} \mathcal{D}_3 \begin{pmatrix} E'_{3R} \\ E'_{3L} \end{pmatrix}. \quad (3.25)$$

Donde se han denotado a los campos primados aquellos que están evaluados en  $x = d$  y a los no primados lo que están evaluados en  $x = 0$ .

Se enfatiza el hecho de que es posible escribir la relación que hay entre los campos incidentes y los campos de la última capa de la siguiente forma:

$$\begin{pmatrix} E_{1R} \\ E_{1L} \end{pmatrix} = \mathcal{D}_1^{-1} \mathcal{D}_2 \mathcal{P}_2 \mathcal{D}_2^{-1} \mathcal{D}_3 \begin{pmatrix} E'_{3R} \\ E'_{3L} \end{pmatrix}. \quad (3.26)$$

Se define ahora la *matriz de transferencia* como:

$$\mathcal{M} \equiv \mathcal{D}_1^{-1} \mathcal{D}_2 \mathcal{P}_2 \mathcal{D}_2^{-1} \mathcal{D}_3. \quad (3.27)$$

Naturalmente  $\mathcal{M}$  es una matriz  $2 \times 2$  de la forma:

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix}. \quad (3.28)$$

Es posible usar a  $\mathcal{M}$  para cuantificar qué tanta energía absorbe un determinado sistema, para ello hay que recordar que los coeficientes de transmisión y reflexión de ondas son:  $r \equiv \frac{E_{1L}}{E_{1R}}$  y  $t \equiv \frac{E_{3R}}{E_{1R}}$ , en términos de los coeficientes de la matriz de transferencia se expresan como:

$$r = \frac{M_{21}}{M_{11}}. \quad (3.29)$$

$$t = \frac{1}{M_{11}}. \quad (3.30)$$

Para dar énfasis a cuánta energía se está propagando entre los medios es conveniente introducir los conceptos de *reflectancia* y *transmitancia*, para ello hay que recordar que el vector de Poynting está definido como:

$$\vec{S} \equiv \vec{E} \times \vec{H}. \quad (3.31)$$

Como es usual, se trabaja con su promedio temporal el cual es:

$$\langle \vec{S} \rangle = \frac{\vec{k}}{2\omega\mu} |\vec{E}|^2. \quad (3.32)$$

La *reflectancia* es la proyección del vector de Poynting sobre la dirección normal a la superficie de incidencia, no se ha considerado la dirección paralela debido a que en ella el flujo de energía es constante. Se tiene entonces:

$$\mathcal{R} = \frac{\left| \hat{x} \cdot \langle \vec{S}_{1L} \rangle \right|}{\left| \hat{x} \cdot \langle \vec{S}_{1R} \rangle \right|} = \frac{\left| \frac{k_1}{2\omega\mu_1} \left| \vec{E}_{1L} \right|^2 \right|}{\left| \frac{k_1}{2\omega\mu_1} \left| \vec{E}_{1R} \right|^2 \right|} = |r|^2. \quad (3.33)$$

Para la *transmitancia* la expresión es:

$$\mathcal{T} = \frac{\left| \hat{x} \cdot \langle \vec{S}_{3R} \rangle \right|}{\left| \hat{x} \cdot \langle \vec{S}_{1R} \rangle \right|} = \frac{\left| \frac{k_3}{2\omega\mu_3} \left| \vec{E}_{3R} \right|^2 \right|}{\left| \frac{k_1}{2\omega\mu_1} \left| \vec{E}_{1R} \right|^2 \right|}. \quad (3.34)$$

Ya que se están considerando materiales diamagnéticos las permeabilidades magnéticas son muy parecidas, es decir  $\mu_1 \approx \mu_3$ , además como la componente del vector de onda en la dirección  $x$  es  $k_x = \frac{\omega}{v} \cos \theta$ , entonces la ecuación anterior se reescribe:

$$\mathcal{T} = \frac{\left| \frac{v_1 \cos \theta_3 \left| \vec{E}_{3R} \right|^2}{v_3 \cos \theta_1 \left| \vec{E}_{1R} \right|^2} \right|}{\left| \frac{n_3 \cos \theta_3 \left| \vec{E}_{3R} \right|^2}{n_1 \cos \theta_1 \left| \vec{E}_{1R} \right|^2} \right|} = \left| \frac{n_3 \cos \theta_3 |t|^2}{n_1 \cos \theta_1} \right|. \quad (3.35)$$

Usando los elementos de la matriz de transferencia, las cantidades  $\mathcal{R}$  y  $\mathcal{T}$  se escriben como:

$$\mathcal{R} = \left| \frac{M_{21}}{M_{11}} \right|^2. \quad (3.36)$$

$$\mathcal{T} = \frac{n_3 \cos \theta_3}{n_1 \cos \theta_1} \left| \frac{1}{M_{11}} \right|^2. \quad (3.37)$$

Cabe mencionar que, al igual que los coeficientes de reflexión y transmisión, la *reflectancia* y *transmitancia* satisfacen la conservación de energía, es decir:

$$\mathcal{R} + \mathcal{T} = 1. \quad (3.38)$$

Si una de las capas es un material absorbente entonces se introduce un coeficiente de absorción  $\mathcal{A}$  tal que:

$$\mathcal{R} + \mathcal{T} + \mathcal{A} = 1. \quad (3.39)$$

**Arreglo de  $N$  nanocavidades**

Considérese un arreglo de  $S$  capas como se muestra en la figura:

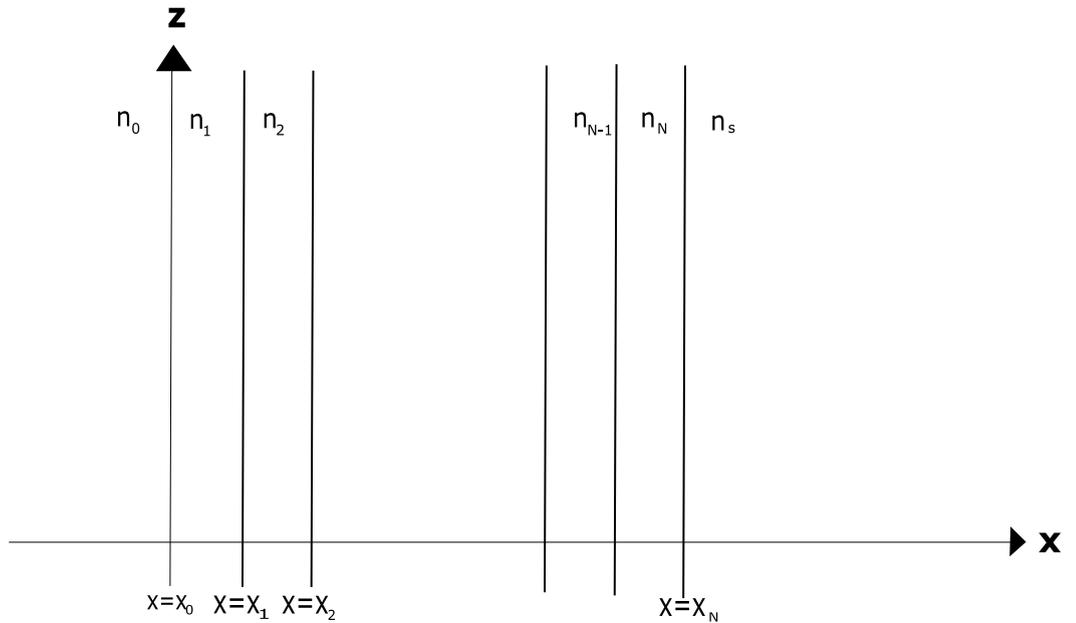


Figura 6: Simplificación de arreglo multicapas

Es conveniente escribir el índice de refracción de este arreglo como una función dependiente de  $x$ :

$$n(x) = \begin{cases} n_0, & \text{si } x < x_0 \\ n_1, & \text{si } x_0 < x < x_1 \\ n_2, & \text{si } x_1 < x < x_2 \\ \vdots & \\ n_N, & \text{si } x_{N-1} < x < x_N \\ n_s, & \text{si } x_N < x \end{cases} \quad (3.40)$$

El espesor de las capas es  $d_1 = x_1 - x_0$  para la primera,  $d_2 = x_2 - x_1$  para la segunda, etc. Además se piensa que el primer y último medio son infinitos.

Nuevamente se trabaja con la polarización  $s$ , mediante un álgebra semejante a la presentada con anterioridad y por ende generalizando el procedimiento, se escribe la relación entre las amplitudes de los campos eléctricos del primer y último medio de forma matricial como:

$$\begin{pmatrix} E_{0R} \\ E_{0L} \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} E_{sR} \\ E_{sL} \end{pmatrix}. \quad (3.41)$$

Ahora la matriz de transferencia es una generalización del caso anterior, explícitamente se tiene la expresión:

$$\mathcal{M} = \mathcal{D}_0^{-1} \left[ \prod_{l=1}^N \mathcal{D}_l \mathcal{P}_l \mathcal{D}_l^{-1} \right] \mathcal{D}_s. \quad (3.42)$$

## 4. Sistema

El arreglo propuesto [6] consiste en una colección de cavidades de Fabry-Perot, estas contienen dentro de sí una molécula orgánica: *Eristrosina B* la cual ha mostrado ser un buen material generador de excitones de Frenkel a temperatura ambiente [7]. El material de las superficies reflejantes (espejos) de las cavidades es plata, cada una de ellas tiene un espesor constante.

Los espesores de cada capa son los siguientes:

- Espesor de espejos delgados:  $30nm$
- Espesor de espejos gruesos:  $40nm$
- Espesor de la Eritrosina B:  $140nm$

Se consideran dos configuraciones de 20 cavidades cada una:

### *Configuración trivial*

Esta consiste en tener los espejos delgados en las posiciones pares y los espejos gruesos en las impares.

### *Configuración topológica*

Esta configuración se obtiene si se invierte el orden de los espejos, en otras palabras, los espejos gruesos en las posiciones pares y los espejos delgados en las impares (el motivo del nombre de esta configuración quedará claro en secciones posteriores).

El propósito de estos acomodos es lograr arreglos que se asemejen a la cadena descrita en el modelo *SSH* (cuyas características se estudiarán en la sección 8).

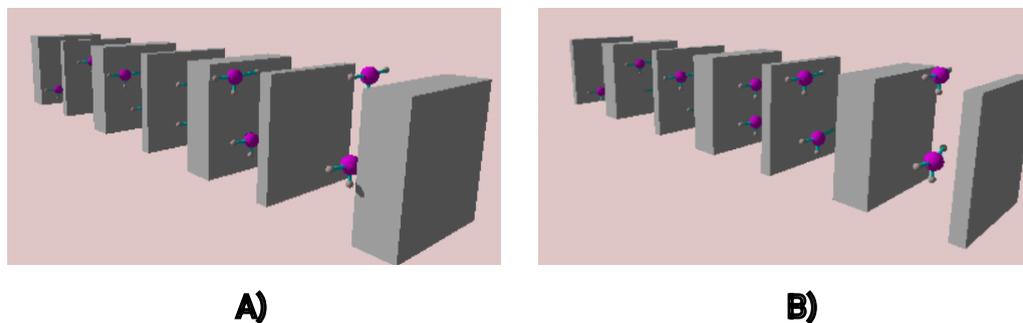


Figura 7: A) Simplificación de la configuración trivial. En la figura se pueden ver sólo 6 cavidades; las capas grises representan los espejos de plata y los objetos color violeta entre ellas a las moléculas orgánicas. Las posiciones impares son ocupadas por espejos gruesos y las pares por espejos delgados. B) Simplificación de la configuración topológica. En la figura se pueden ver sólo 6 cavidades. Las posiciones impares ahora son ocupadas por espejos delgados y las pares por espejos gruesos.

### Cavidad singular

Conviene ahora realizar un estudio sobre las características de una sola cavidad. Para ello considérese una cavidad de Fabry-Perot: el par de espejos de plata tiene de espesor  $40nm$  y entre ellos se tiene una capa de espesor de  $140nm$  de *Eritrosina B*.

Para encontrar el patrón de reflectancia se han tomado los índices de refracción de la plata y de la *Eritrosina B* de forma experimental [7, 8], con estos datos en adición a los espesores de cada capa es posible construir las matrices  $\mathcal{D}$  y  $\mathcal{P}$ . Para el cálculo de la matriz de transferencia (y por ende de la reflectancia) se varían los ángulos de incidencia (y junto con ello la componente paralela a la superficie de incidencia del vector de onda) y la frecuencia angular de la luz. Numéricamente se obtiene el siguiente resultado donde se ha graficado la reflectancia en función de  $k_{\parallel}$  y  $\omega$  (véase la nota al final de la sección 11).

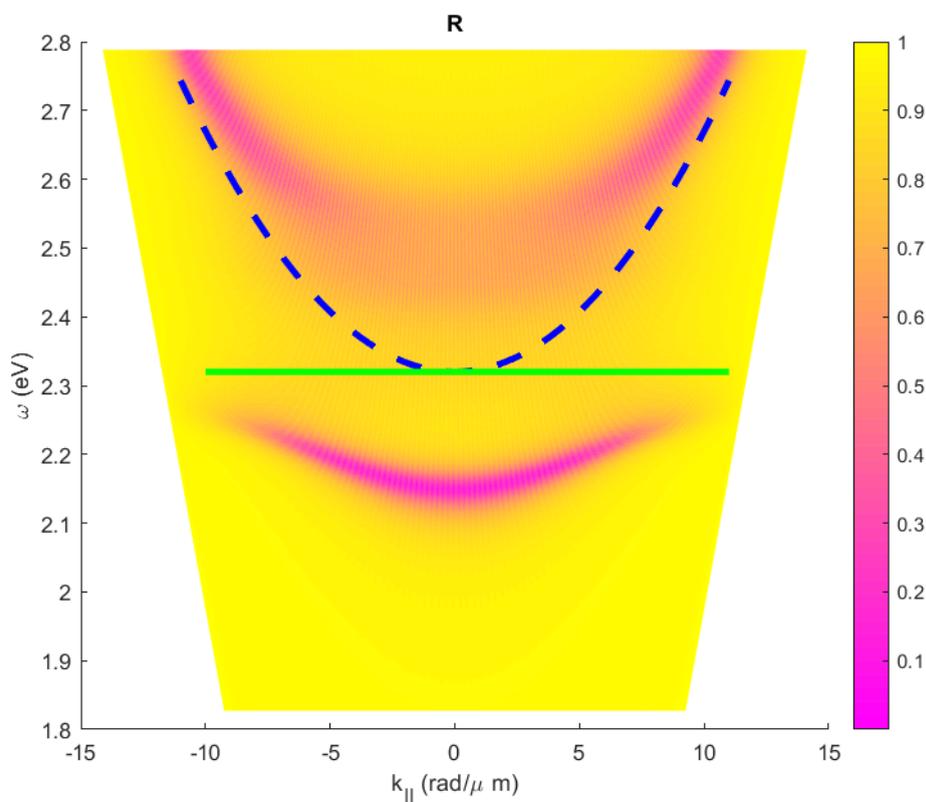


Figura 8: Patrón de reflectancia de una sola cavidad. Se ha graficado la reflectancia como función de la componente paralela a la superficie de incidencia del vector de onda y la frecuencia angular de la radiación incidente ( $\omega\hbar$ ). Los índices de refracción de la *Eristrosina B* y de la plata se han tomado experimentalmente [7, 8], el espesor de cada espejo es de  $40nm$  y el de la *Eristrosina B* es de  $140nm$ . La línea punteada corresponde a la dispersión del fotón mientras que la línea continua corresponde al máximo de absorción de la *Eritrosina B*  $\approx 2.32eV$ .

Las dos bandas de reflectancia mínima corresponden a los modos normales del sistema, es decir, al acoplamiento entre la cavidad y las moléculas orgánicas de la *Eristrosina B*. Se han graficado sobre el patrón dos curvas; la punteada de color azul corresponde a la dispersión del fotón y la continua de color verde al máximo de absorción de la molécula orgánica.

La energía del fotón está dada por:

$$\mathcal{E}_\gamma = \hbar ck. \quad (4.1)$$

En donde  $\hbar$  es la constante reducida de Planck,  $c$  es la velocidad de la luz y  $k$  es la magnitud del vector de onda. Es posible descomponer al vector de onda en sus componentes paralela y normal a la superficie de incidencia, es decir:  $k = \sqrt{k_{\parallel}^2 + k_{\perp}^2}$ , entonces la ecuación anterior se puede escribir como:

$$\mathcal{E}_\gamma = \frac{\hbar c}{n_{ef}} k_{\perp} + \frac{\hbar c}{2n_{ef}k_{\perp}} k_{\parallel}^2. \quad (4.2)$$

En donde se ha empleado desarrollo de Taylor, cabe mencionar además que  $n_{ef}$  es un índice de refracción efectivo representativo del sistema. Puede verse entonces que la dispersión del fotón posee una dependencia del ángulo de incidencia dada por la componente paralela del vector de onda, es decir:  $\mathcal{E}_\gamma = \mathcal{E}_\gamma(\theta)$ .

Ahora, con respecto de la *Eristrosina B*, se presenta a continuación su espectro de absorción:

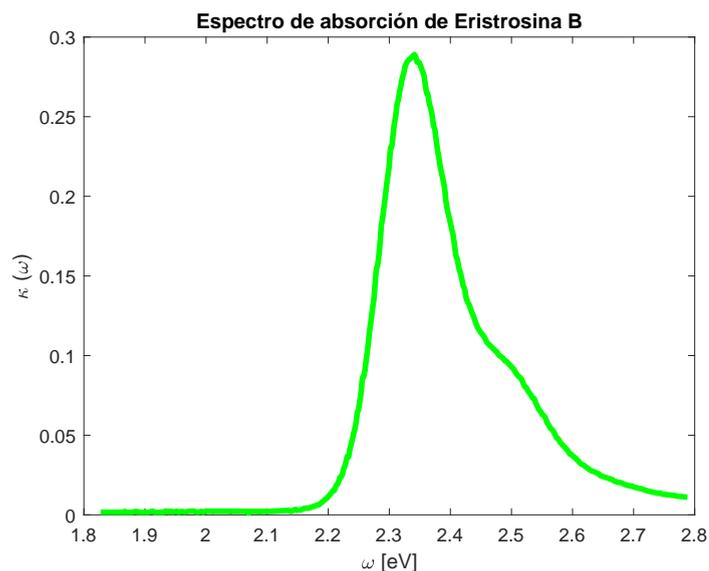


Figura 9: Gráfica de la parte imaginaria del índice de refracción de la Eristrosina B. Es posible notar que hay un pico máximo en  $\omega \approx 2.32$  eV, además hay un pequeño "hombro" en  $\omega \approx 2.5$  eV

Se ha graficado entonces la absorción de las moléculas orgánicas como una constante independiente del ángulo de incidencia, es decir, la energía del excitón se considera constante:

$$\mathcal{E}_\chi = 2.32eV. \quad (4.3)$$

Más adelante se hará un análisis de este mismo patrón desde la perspectiva de los polaritones.

## 5. Implementación numérica

Mediante el formalismo de la matriz de transferencia se encuentran numéricamente los valores de la *reflectancia* de los dos sistemas presentados anteriormente, a continuación se muestran los resultados obtenidos donde se ha calculado el valor de  $\mathcal{R}$  con respecto a la componente paralela a la superficie del vector de onda y a la frecuencia de la radiación incidente (véase la nota al final de la sección 11).

*Arreglo trivial*

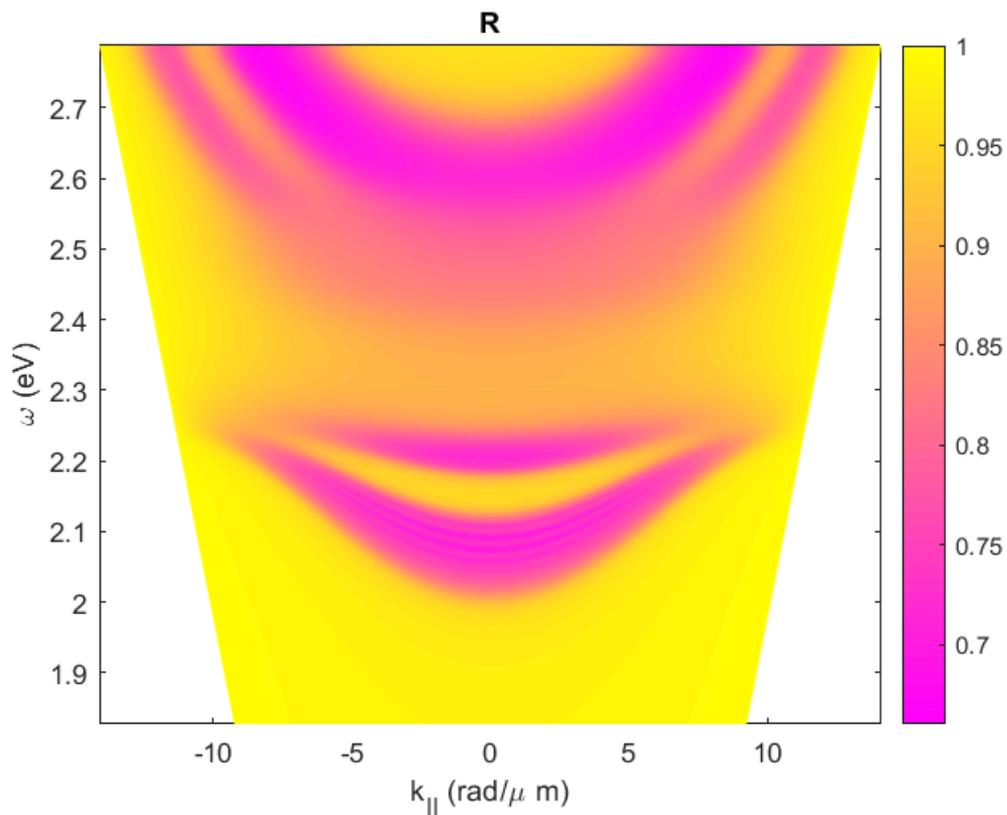


Figura 10: Patrón de reflectancia del arreglo trivial. Se ha graficado la reflectancia como función de  $k_{||}$  y la frecuencia angular de la radiación incidente ( $\omega\hbar$ ) empleando los índices de refracción de la plata y *Eritrosina B* [7, 8] además de los espesores de las capas dados en la sección anterior. Es posible visualizar cuatro bandas donde la reflectancia es mínima.

## Arreglo topológico

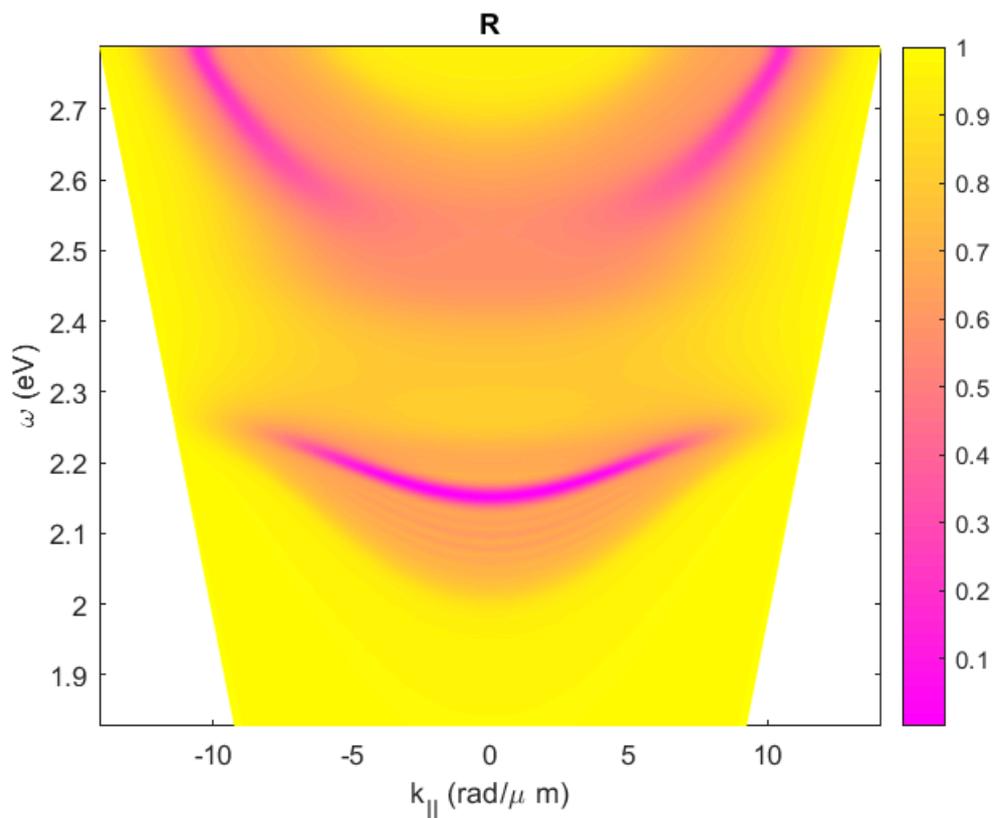


Figura 11: Patrón de reflectancia del arreglo topológico. Se ha graficado la reflectancia como función de  $k_{||}$  y la frecuencia angular de la radiación incidente ( $\omega\hbar$ ) empleando los índices de refracción de la plata y *Eritrosina B* [7, 8] además de los espesores de las capas dados en la sección anterior. Además de las cuatro bandas de reflectancia mínima se aprecia la aparición de dos bandas adicionales.

En la figura 10 se pueden apreciar 4 bandas donde la reflectancia es mínima (el porqué de su aparición quedará claro más adelante); dos se encuentran encima del valor  $\approx 2.32eV$  de energía y dos por debajo. Estas bandas no poseen un grosor uniforme pues se hacen más gruesas o delgadas conforme cambia el valor de  $k_{||}$ . Es posible notar que en ciertas zonas (cerca de la incidencia normal) algunas de las bandas se difuminan casi por completo. Con respecto a la figura 11, se pueden ver dos bandas de mínima reflectancia adicionales que aparecen justo entre el par de bandas del otro arreglo.

Los patrones de reflectancia calculados delatan la existencia de modos normales en cada uno de los sistemas, es decir, ciertas zonas donde el arreglo tiende a absorber la mayor parte de la energía que le es dada. Hasta aquí la electrodinámica clásica puede dar información acerca de la naturaleza del sistema estudiado, para ir más allá y dar una explicación más detallada a las características vistas en los patrones es necesario recurrir al modelo *SSH* ya que este formalismo toma en cuenta la interacción entre las componentes del sis-

tema, es decir, el acoplamiento entre los fotones y excitones. Se mostrará que este es un buen complemento para entender detalles que el formalismo de matriz de transferencia no es capaz de aclarar como el motivo por el cuál hay 4 bandas o el porqué el patrón de reflectancia de la cavidad singular y la configuración topológica tienen una alta similitud.

## 6. Formalismo de segunda cuantización

Cuando se estudian sistemas de muchos cuerpos tales que requieren un tratamiento cuántico, es necesario emplear el formalismo de *segunda cuantización* pues es una formulación equivalente a la cuantización usual de una sola partícula pero tiene dos ventajas importantes; la primera es que brinda una idea general de las interacciones entre las componentes del sistema, la segunda es que evita una enorme dificultad algebraica. Para los fines de este trabajo, sólo se presentarán las herramientas matemáticas que se usarán [9] pues ir más a fondo en el desarrollo de la teoría escapa al propósito del presente escrito.

Para comenzar se hace énfasis en la relación entre las funciones de onda de un sólo cuerpo con las funciones de onda de muchos cuerpos en primera cuantización. Considérese entonces dos partículas, cada una en un estado diferente; una primera propuesta de la función de onda de este sistema sería:

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \phi_1(\mathbf{r}_1)\phi_2(\mathbf{r}_2) \quad (6.1)$$

Sin embargo, debido a que no es posible distinguir a las dos partículas la función de onda anterior tiene que ser modificada de tal forma que tome en cuenta esta propiedad, una segunda propuesta es:

$$\Phi_{\pm}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \phi_1(\mathbf{r}_1)\phi_2(\mathbf{r}_2) \pm \phi_2(\mathbf{r}_1)\phi_1(\mathbf{r}_2) \quad (6.2)$$

Ahora, debido a que las partículas se clasifican de acuerdo al valor de su espín como fermiones (aquellas con espín semientero) o bosones (las que poseen espín entero) a las primeras se les asigna la función de onda con el signo  $(-)$  y a las otras la función de onda con signo  $(+)$ . El motivo de esto es que según el *principio de exclusión de Pauli* dos fermiones no pueden ocupar el mismo estado simultáneamente:

$$\Phi_{-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \phi_1(\mathbf{r}_1)\phi_1(\mathbf{r}_2) - \phi_1(\mathbf{r}_1)\phi_1(\mathbf{r}_2) = 0 \quad (6.3)$$

Se dice entonces que la función de onda de los fermiones está *antisimetrizada* y que la de los bosones está *simetrizada*. Cuando se tienen  $N$  partículas idénticas la función de onda de los fermiones y bosones queda respectivamente como:

$$\Phi_{m_1, \dots, m_N}(r_1, \dots, r_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_{m_1}(r_1) & \cdots & \phi_{m_1}(r_N) \\ \vdots & & \vdots \\ \phi_{m_N}(r_1) & \cdots & \phi_{m_N}(r_N) \end{vmatrix}. \quad (6.4)$$

$$\Phi_{m_1, \dots, m_N}(r_1, \dots, r_N) = \sqrt{\frac{n_1! n_2! \dots}{N!}} \sum_P \phi_{m_1}(r_1) \phi_{m_2}(r_2) \dots \phi_{m_N}(r_N). \quad (6.5)$$

Como anteriormente se indicó, las partículas son indistinguibles, entonces es posible hacer una enorme simplificación y es que la información más importante que se puede extraer de las funciones de onda es *cuántas partículas hay en cada estado*  $\phi_{m_i}(r_i)$ , se procede entonces a hacer un "cambio de variable" tal que:

$$\Phi_{m_1, \dots, m_N}(r_1, \dots, r_N) \implies \Phi_{n_1, \dots, n_N}(r_1, \dots, r_N). \quad (6.6)$$

En donde el número cuántico  $n_1$  indica que hay  $n_1$  partículas en el estado  $\phi_{n_1}$ ,  $n_2$  indica que hay  $n_2$  partículas en  $\phi_{n_2}$ , etc.

Se introduce entonces una nueva base que englobe al número de partículas totales del sistema: la base de número de ocupación de estados independiente del tiempo y se escribe como:

$$|n\rangle = |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_\infty\rangle. \quad (6.7)$$

Cabe mencionar que se asume que el número total de partículas es tal que  $\sum_i n_i = N$ .

Por otra parte, se desea que esta base satisfaga dos propiedades importantes:

*Ortonormalidad*

$$\langle n'_1, n'_2, \dots, n'_i, \dots, n'_\infty | n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_\infty \rangle = \delta_{n'_1, n_1} \delta_{n'_2, n_2} \dots \delta_{n'_i, n_i} \dots \delta_{n'_\infty, n_\infty}. \quad (6.8)$$

*Completitud*

$$\sum_{n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_\infty} |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_\infty\rangle \langle n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_\infty| = 1. \quad (6.9)$$

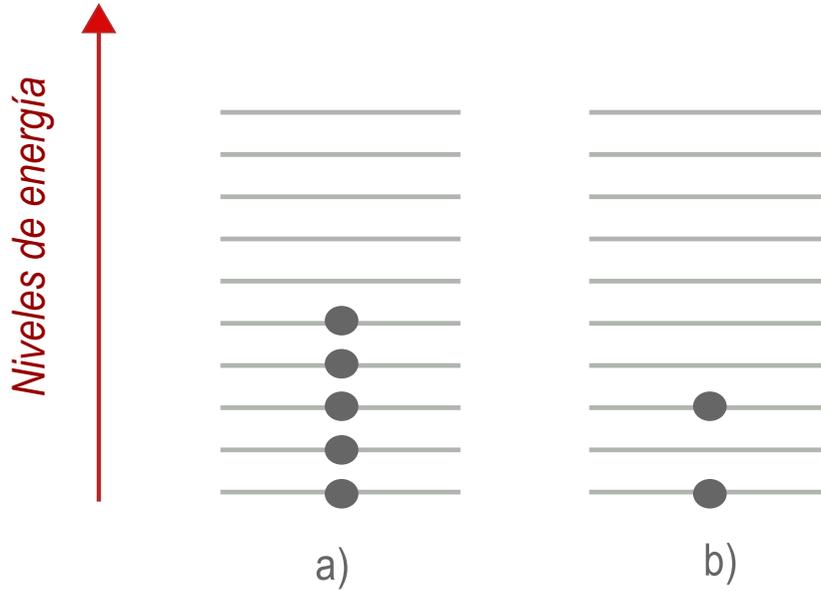


Figura 12: Representación simplificada de la base en el formalismo del número de ocupación para el caso fermiónico. En el inciso a) el estado es:  $|1_1, 1_2, 1_3, 1_4, 1_5, 0_6, 0_7, 0_8, 0_9, 0_{10}\rangle$ , en b) el estado es:  $|1_1, 0_2, 1_3, 0_4, 0_5, 0_6, 0_7, 0_8, 0_9, 0_{10}\rangle$ .

En el formalismo del *número de ocupación* los efectos de los operadores de potencial externo  $V(\vec{r}, t)$  están descritos por *operadores de creación* ( $\hat{c}^\dagger$ ) y *aniquilación* ( $\hat{c}$ ) pues estos esencialmente realizan la misma función que el potencial ya que "mueven" a las partículas entre niveles de energía. Las reglas algebraicas de estos son las siguientes [1]:

*Operadores fermiónicos*

$$\hat{c}_k^\dagger |n_1, \dots, n_k, \dots, n_\infty\rangle = (-1)^{(n_1 + \dots + n_{k-1})} (1 - n_k) |n_1, \dots, n_k + 1, \dots, n_\infty\rangle. \quad (6.10)$$

$$\hat{c}_k |n_1, \dots, n_k, \dots, n_\infty\rangle = (-1)^{(n_1 + \dots + n_{k-1})} (n_k) |n_1, \dots, n_k - 1, \dots, n_\infty\rangle. \quad (6.11)$$

*Operadores bosónicos*

$$\hat{c}_k^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_k, \dots, n_\infty\rangle = \sqrt{n_k + 1} |n_1, n_2, \dots, n_k + 1, \dots, n_\infty\rangle. \quad (6.12)$$

$$\hat{c}_k |n_1, n_2, \dots, n_k, \dots, n_\infty\rangle = \sqrt{n_k} |n_1, n_2, \dots, n_k - 1, \dots, n_\infty\rangle. \quad (6.13)$$

Nótese que los coeficientes que multiplican a los *ket* en ambos casos impiden que se aniquilen partículas en estados que no están poblados. Además, el coeficiente que multiplica al *ket* en el caso fermiónico no permite que más de una partícula ocupe el mismo estado.

Una diferencia adicional entre las reglas de los operadores fermiónicos y bosónicos es la cantidad  $(-1)^{(n_1+\dots+n_{k-1})}$  la cual está presente debido a la *antisimetría* de la estadística fermiónica.

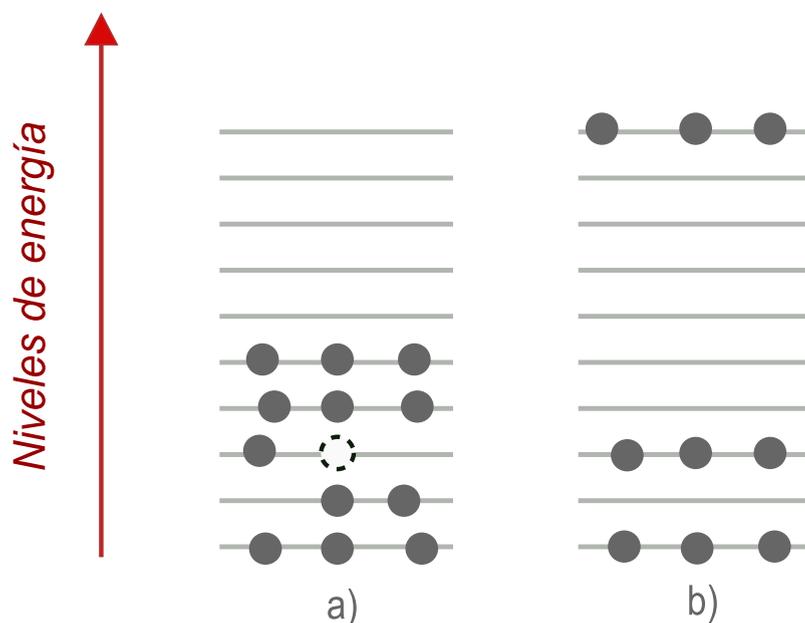


Figura 13: Considerando partículas bosónicas, la situación en a) puede ser descrita como:  $\hat{c}_3|3_1, 2_2, 2_3, 3_4, 3_5, 0_6, 0_7, 0_8, 0_9, 0_{10}\rangle = |3_1, 2_2, 1_3, 3_4, 3_5, 0_6, 0_7, 0_8, 0_9, 0_{10}\rangle$  mientras que la situación en b) es:  $\hat{c}_{10}^\dagger|3_1, 0_2, 3_3, 0_4, 0_5, 0_6, 0_7, 0_8, 0_9, 2_{10}\rangle = |3_1, 0_2, 3_3, 0_4, 0_5, 0_6, 0_7, 0_8, 0_9, 3_{10}\rangle$

Es importante señalar que los operadores  $\hat{c}_k$  y  $\hat{c}_k^\dagger$  no son hermitianos, no representan cantidades observables, sin embargo, al aplicarlos juntos es posible demostrar que:

$$(\hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k)^\dagger = \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k. \quad (6.14)$$

Entonces al aplicar simultáneamente estos operadores se obtiene un operador hermitiano que sí representa un observable, se define entonces al operador de *número de ocupación* como:

$$\hat{n}_k \equiv \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k. \quad (6.15)$$

Cuyo valor propio es el número de partículas en el estado  $k$ , es decir:

$$\hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k |n_1, n_2, \dots, n_k, \dots, n_\infty\rangle = N_k |n_1, n_2, \dots, n_k, \dots, n_\infty\rangle. \quad (6.16)$$

Estos operadores obedecen las reglas de conmutación fermiónicas y bosónicas [1]:

*Reglas de anticonmutación fermiónica*

$$\{\hat{c}_k, \hat{c}_{k'}^\dagger\} = \delta_{k,k'}. \quad (6.17)$$

$$\{\hat{c}_k, \hat{c}_{k'}\} = 0. \quad (6.18)$$

$$\{\hat{c}_k^\dagger, \hat{c}_{k'}^\dagger\} = 0. \quad (6.19)$$

*Reglas de conmutación bosónica*

$$[\hat{c}_k, \hat{c}_{k'}^\dagger] = \delta_{k,k'}. \quad (6.20)$$

$$[\hat{c}_k, \hat{c}_{k'}] = 0. \quad (6.21)$$

$$[\hat{c}_k^\dagger, \hat{c}_{k'}^\dagger] = 0. \quad (6.22)$$

Finalmente, el operador hamiltoniano en primera cuantización es:

$$H = \sum_l \left[ \frac{p_l^2}{2m} + U(\vec{r}_l) \right] + \frac{1}{2} \sum_{l,j} V(r_l - r_j). \quad (6.23)$$

Su equivalente en segunda cuantización es [1]:

$$\hat{H} = \sum_k \epsilon_k \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k + \frac{1}{2} \sum_{k,l,m,n} V_{klmn} \hat{c}_l^\dagger \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_m \hat{c}_n. \quad (6.24)$$

Donde  $\epsilon_k$  es la relación de dispersión y  $V_{klmn}$  satisface:

$$V_{klmn} = \int d^3r \int d^3r' \phi_k^*(\vec{r}) \phi_l^*(\vec{r}') V(\vec{r} - \vec{r}') \phi_m(\vec{r}) \phi_n(\vec{r}'). \quad (6.25)$$

## 7. Polaritones

Ya que se tienen las herramientas elementales del formalismo de la segunda cuantización es posible describir matemáticamente al *polaritón*. Es importante mencionar que en los cálculos venideros se tomará  $\hbar = 1$  en aras de hacer menos densa la presentación del álgebra. Considérese un sistema formado por un fotón y un excitón de Frenkel, entonces la base queda descrita como a continuación se presenta:

$$|\gamma\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (7.1)$$

$$|\chi\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (7.2)$$

Donde  $\gamma$  representa al fotón y  $\chi$  al excitón. Ahora se desea describir la interacción entre los excitones y los fotones, para ello es necesario tomar en cuenta las energías propias de cada uno y el cómo se acoplan entre sí.

Se propone un hamiltoniano que contenga esta información de la siguiente forma:

$$\hat{H} = \hat{H}_\gamma + \hat{H}_\chi + \hat{H}_{\gamma\chi}. \quad (7.3)$$

El primer término debe describir sólo a los fotones, entonces al calcular su elemento de matriz sobre la base que se ha definido se debe satisfacer que:

$$\langle\gamma|\hat{H}_\gamma|\gamma\rangle = \omega_\gamma, \quad (7.4)$$

$$\langle\chi|\hat{H}_\gamma|\gamma\rangle = 0, \quad (7.5)$$

$$\langle\gamma|\hat{H}_\gamma|\chi\rangle = 0, \quad (7.6)$$

$$\langle\chi|\hat{H}_\gamma|\chi\rangle = 0. \quad (7.7)$$

Para ello es necesario que el primer término tenga la forma siguiente:

$$\hat{H}_\gamma = \begin{pmatrix} \omega_\gamma & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \omega_\gamma |\gamma\rangle\langle\gamma|. \quad (7.8)$$

De manera análoga, para el excitón se tiene:

$$\langle\gamma|\hat{H}_\chi|\gamma\rangle = 0, \quad (7.9)$$

$$\langle\chi|\hat{H}_\chi|\gamma\rangle = 0, \quad (7.10)$$

$$\langle\gamma|\hat{H}_\chi|\chi\rangle = 0, \quad (7.11)$$

$$\langle\chi|\hat{H}_\chi|\chi\rangle = \omega_\chi. \quad (7.12)$$

Entonces el segundo término del hamiltoniano es:

$$\hat{H}_\chi = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \omega_\chi \end{pmatrix} = \omega_\chi |\chi\rangle\langle\chi|. \quad (7.13)$$

Finalmente, el término de acoplamiento entre el excitón y el fotón debe cumplir:

$$\langle\gamma|\hat{H}_{\gamma\chi}|\gamma\rangle = 0, \quad (7.14)$$

$$\langle\chi|\hat{H}_{\gamma\chi}|\gamma\rangle = \Omega, \quad (7.15)$$

$$\langle\gamma|\hat{H}_{\gamma\chi}|\chi\rangle = \Omega, \quad (7.16)$$

$$\langle\chi|\hat{H}_{\gamma\chi}|\chi\rangle = 0. \quad (7.17)$$

Entonces el último término se expresa como:

$$\hat{H}_{\gamma\chi} = \begin{pmatrix} 0 & \Omega \\ \Omega & 0 \end{pmatrix} = \Omega|\chi\rangle\langle\gamma| + \Omega|\gamma\rangle\langle\chi|. \quad (7.18)$$

El Hamiltoniano de la ecuación 7.3 tiene como representación matricial:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \omega_\gamma & \Omega \\ \Omega & \omega_\chi \end{pmatrix}. \quad (7.19)$$

Ahora, sus energías propias son:

$$\begin{vmatrix} \omega_\gamma - E & \Omega \\ \Omega & \omega_\chi - E \end{vmatrix} = 0. \quad (7.20)$$

Se tienen dos valores de  $E$  los cuales son:

$$E_\pm = \frac{\omega_\gamma + \omega_\chi \pm \sqrt{(\omega_\gamma - \omega_\chi)^2 + 4\Omega^2}}{2}. \quad (7.21)$$

Para visualizar este resultado, es conveniente definir la diferencia de energías propias del fotón y el excitón como  $\delta \equiv \omega_\gamma - \omega_\chi$ :

$$E_\pm = \omega_\chi + \frac{\delta \pm \sqrt{\delta^2 + 4\Omega^2}}{2}. \quad (7.22)$$

La gráfica de las energías propias del hamiltoniano es la siguiente donde el eje horizontal es  $\delta$  y el vertical la energía:

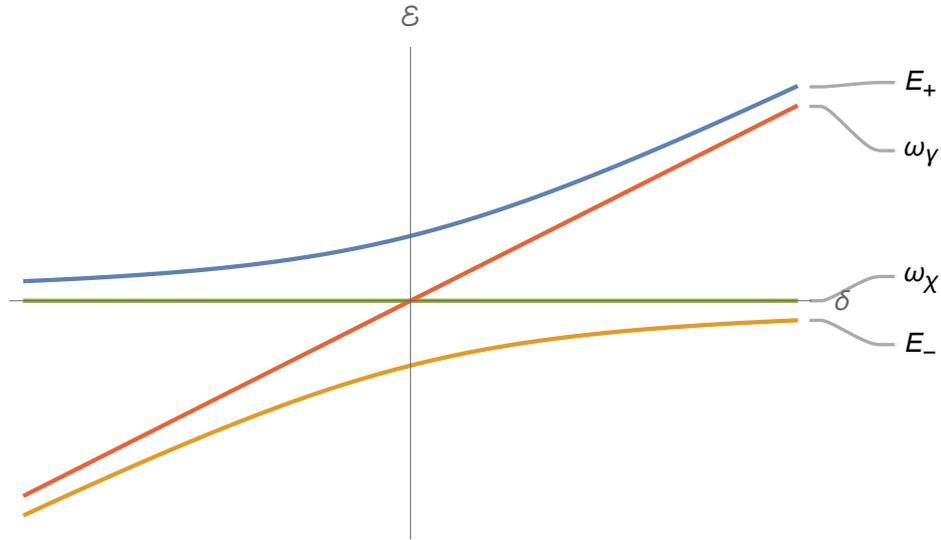


Figura 14: Energías propias de  $\hat{H}$  junto con las energías del fotón y del excitón, por simplicidad esta última se ha fijado a cero. El eje vertical representa la energía y el horizontal la diferencia de energías del fotón y el excitón  $\delta = \omega_\gamma - \omega_\chi$ .

Es pertinente dar atención a dos puntos importantes:

- Si la diferencia entre  $\omega_\gamma$  y  $\omega_\chi$  es muy grande ( $|\delta| \gg 1$ ), las energías propias de  $\hat{H}$  tienden a alguna de ellas.
- A medida que la diferencia entre  $\omega_\gamma$  y  $\omega_\chi$  se aproxima a cero ( $\delta \approx 0$ ) las energías propias de  $\hat{H}$  encuentran su máximo acercamiento el cual es  $2\Omega$

Ahora, según el formalismo del número de ocupación, el hamiltoniano es [7]:

$$\hat{H} = \omega_\gamma \hat{a}^\dagger \hat{a} + \omega_\chi \hat{\chi}^\dagger \hat{\chi} + \Omega (\hat{a}^\dagger \hat{\chi} + \hat{\chi}^\dagger \hat{a}). \quad (7.23)$$

Donde  $\hat{a}^\dagger$  y  $\hat{a}$  son los operadores de creación y aniquilación del fotón mientras que  $\hat{\chi}^\dagger$  y  $\hat{\chi}$  son los operadores de creación y aniquilación del excitón. El tercer término describe la interacción entre ambas entidades, es decir, la creación de un fotón a partir de la aniquilación del excitón y viceversa, la constante  $\Omega$  cuantifica el nivel de acoplamiento entre estas.

Se enfatiza el hecho de que es posible escribir a  $\hat{H}$  de la siguiente forma:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \hat{a}^\dagger & \hat{\chi}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega_\gamma & \Omega \\ \Omega & \omega_\chi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{a} \\ \hat{\chi} \end{pmatrix}. \quad (7.24)$$

En aras de encontrar una nueva base donde el hamiltoniano sea diagonal, se introduce la transformación unitaria:

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (7.25)$$

Entonces la ecuación 7.24 se escribe como:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \hat{\alpha}^\dagger & \hat{\chi}^\dagger \end{pmatrix} \hat{U}^\dagger \hat{U} \begin{pmatrix} \omega_\gamma & \Omega \\ \Omega & \omega_\chi \end{pmatrix} \hat{U}^\dagger \hat{U} \begin{pmatrix} \hat{\alpha} \\ \hat{\chi} \end{pmatrix}, \quad (7.26)$$

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \hat{\alpha}^\dagger & \hat{\chi}^\dagger \end{pmatrix} \hat{U}^\dagger \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega_\gamma & \Omega \\ \Omega & \omega_\chi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \hat{U} \begin{pmatrix} \hat{\alpha} \\ \hat{\chi} \end{pmatrix}. \quad (7.27)$$

El hamiltoniano expresado en términos de la base de los polaritones tiene la forma:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \hat{U}^\dagger & \hat{L}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega_{UP} & 0 \\ 0 & \omega_{LP} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{U} \\ \hat{L} \end{pmatrix}. \quad (7.28)$$

Al comparar las ecuaciones 7.27 y 7.28 es fácil notar que se deben de satisfacer las siguientes condiciones:

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega_\gamma & \Omega \\ \Omega & \omega_\chi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \omega_{UP} & 0 \\ 0 & \omega_{LP} \end{pmatrix}. \quad (7.29)$$

Igualando componentes se obtiene:

$$\omega_\gamma \cos^2 \theta + \omega_\chi \sin^2 \theta + 2\Omega \sin \theta \cos \theta = \omega_{UP}, \quad (7.30)$$

$$\Omega (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta) + (\omega_\chi - \omega_\gamma) \sin \theta \cos \theta = 0, \quad (7.31)$$

$$\Omega (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta) + (\omega_\chi - \omega_\gamma) \sin \theta \cos \theta = 0, \quad (7.32)$$

$$\omega_\gamma \cos^2 \theta + \omega_\chi \sin^2 \theta - 2\Omega \sin \theta \cos \theta = \omega_{LP}. \quad (7.33)$$

Al resolver las ecuaciones anteriores se encuentra que los elementos de la transformación unitaria  $\hat{U}$  deben ser:

$$\sin \theta = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \frac{\omega_\gamma - \omega_\chi}{\sqrt{4\Omega^2 + (\omega_\gamma - \omega_\chi)^2}}}, \quad (7.34)$$

$$\cos \theta = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{\omega_\gamma - \omega_\chi}{\sqrt{4\Omega^2 + (\omega_\gamma - \omega_\chi)^2}}}. \quad (7.35)$$

Estas cantidades son llamadas *coeficientes de Hopfield* y cuantifican "qué tan excitónico o fotónico" es el polaritón, expresándolos en términos de la diferencia de energías

$\delta \equiv \omega_\gamma - \omega_\chi$ , se tiene:

$$\sin \theta = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \frac{\delta}{\sqrt{4\Omega^2 + \delta^2}}}, \quad (7.36)$$

$$\cos \theta = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{\delta}{\sqrt{4\Omega^2 + \delta^2}}}. \quad (7.37)$$

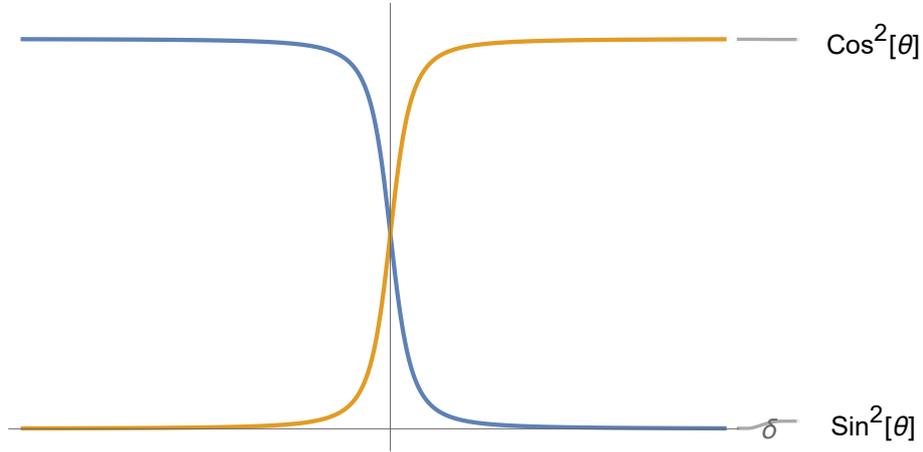


Figura 15: Gráfica del cuadrado de los coeficientes de Hopfield

El resto de las ecuaciones dan el valor de las energías propias  $\omega_{UP}$  y  $\omega_{LP}$ :

$$\omega_{UP} = \frac{\omega_\gamma + \omega_\chi + \sqrt{(\omega_\gamma - \omega_\chi)^2 + 4\Omega^2}}{2}, \quad (7.38)$$

$$\omega_{LP} = \frac{\omega_\gamma + \omega_\chi - \sqrt{(\omega_\gamma - \omega_\chi)^2 + 4\Omega^2}}{2}. \quad (7.39)$$

Las cuales coinciden con las que ya se habían calculado previamente.

Los operadores en esta nueva base son:

$$\begin{pmatrix} \hat{U}^\dagger & \hat{L}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{\alpha}^\dagger & \hat{\chi}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}, \quad (7.40)$$

$$\begin{pmatrix} \hat{U} \\ \hat{L} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\alpha} \\ \hat{\chi} \end{pmatrix}. \quad (7.41)$$

Donde  $\hat{U}$  corresponde al polaritón superior (*upper polariton*) y  $\hat{L}$  al polaritón inferior (*lower polariton*).

Explícitamente se tiene:

$$\hat{U} = \hat{\alpha} \cos \theta + \hat{\chi} \sin \theta, \quad (7.42)$$

$$\hat{L} = -\hat{\alpha} \sin \theta + \hat{\chi} \cos \theta, \quad (7.43)$$

$$\hat{U}^\dagger = \hat{\alpha}^\dagger \cos \theta + \hat{\chi}^\dagger \sin \theta, \quad (7.44)$$

$$\hat{L}^\dagger = -\hat{\alpha}^\dagger \sin \theta + \hat{\chi}^\dagger \cos \theta. \quad (7.45)$$

Con este desarrollo se ha conseguido expresar el hamiltoniano en forma diagonal en una nueva base, pues se ha reemplazado la base de los excitones y fotones por la de los *polaritones* cuyas energías propias están dadas por las ecuaciones 7.38 y 7.39.

Es importante enfatizar que el desarrollo anterior fue asumiendo una incidencia normal pues en general la energía del fotón depende del ángulo de incidencia. Como se mostró anteriormente, las energías del fotón y excitón están dadas por las siguientes expresiones:

$$\omega_\gamma = \frac{\hbar c}{n_{ef}} k_\perp + \frac{\hbar c}{2n_{ef}k_\perp} k_\parallel^2. \quad (7.46)$$

$$\omega_\chi = cte \quad (7.47)$$

Al sustituir estas energías en las ecuaciones (7.38) y (7.39) es posible obtener la gráfica de las energías de los polaritones en función del vector de onda  $k_\parallel$  [10]:

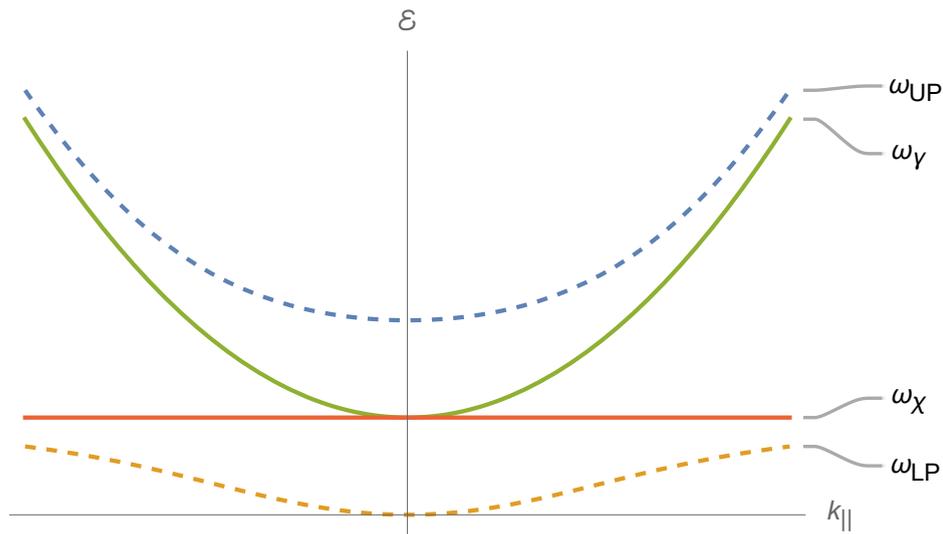


Figura 16: Dispersiones del fotón, excitón y polaritones upper y lower

## 8. Modelo SSH

Las configuraciones del sistema presentadas en la sección 4 pueden ser descritas con gran precisión mediante el hamiltoniano propuesto por los físicos W. Su, J. Schrieffer y A. Heeger. El modelo *SSH* describe una interacción de amarre fuerte en una sola dimensión, originalmente fue propuesto para estudiar electrones que se mueven a lo largo de una cadena de  $N$  celdas unitarias las cuales están compuestas de dos sitios cada una [11], pese a lo anterior se mostrará que este modelo describe bastante bien el sistema propuesto para este escrito. En términos de segunda cuantización el hamiltoniano es [6]:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{i=1}^N \omega_{\gamma}(\theta) \left( \hat{a}_i^{\dagger} \hat{a}_i + \hat{b}_i^{\dagger} \hat{b}_i \right) + \omega_X \left( \hat{x}_{i,A}^{\dagger} \hat{x}_{i,A} + \hat{x}_{i,B}^{\dagger} \hat{x}_{i,B} \right) \\ & + \Omega \sum_{i=1}^N \left( \hat{a}_i^{\dagger} \hat{x}_{i,A} + \hat{b}_i^{\dagger} \hat{x}_{i,B} + \text{h.c.} \right) \\ & - \sum_{i=1}^N \left( v(\hat{a}_i^{\dagger} \hat{b}_i + \hat{b}_i^{\dagger} \hat{a}_i) + w(\hat{a}_{i+1}^{\dagger} \hat{b}_i + \hat{b}_i^{\dagger} \hat{a}_{i+1}) \right). \end{aligned} \quad (8.1)$$

Donde la notación empleada es:

- $\hat{a}_i^{\dagger}$  &  $\hat{a}_i$ : operadores de creación y aniquilación de fotones en el sitio  $A$
- $\hat{b}_i^{\dagger}$  &  $\hat{b}_i$ : operadores de creación y aniquilación de fotones en el sitio  $B$
- $\hat{\chi}_{i,A}^{\dagger}$  &  $\hat{\chi}_{i,A}$ : operadores de creación y aniquilación de excitones en el sitio  $A$
- $\hat{\chi}_{i,B}^{\dagger}$  &  $\hat{\chi}_{i,B}$ : operadores de creación y aniquilación de excitones en el sitio  $B$
- $\omega_{\gamma}(\theta)$ : energía propia del fotón
- $\omega_X$ : energía propia del excitón
- $v$  &  $w$ : coeficientes de tunelaje de los fotones
- $\Omega$ : constante de acoplamiento entre los fotones y excitones

El subíndice  $i$  señala el número de celda unitaria de la cadena de cavidades, cada celda está formada por dos sitios; A y B, tal como se muestra en la figura:

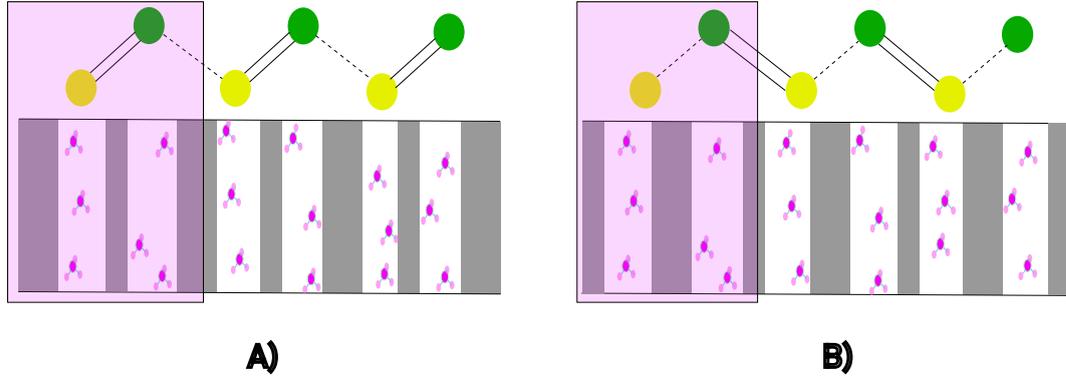


Figura 17: A) Configuración trivial. B) Configuración topológica. Se ha sombreado de rosa la celda unitaria  $i = 1$ . El círculo amarillo representa el sitio A y el verde el sitio B, las líneas paralelas indican un acoplamiento fuerte mientras que la línea punteada señala un acoplamiento débil entre sitios.

De una forma intuitiva se puede notar que los primeros dos términos del hamiltoniano dan información acerca de la energía propia de los fotones y excitones, el tercer término contiene la información del acoplamiento entre ellos y los dos últimos describen el tunelaje de los fotones entre sitios y celdas.

Una propiedad del modelo *SSH* es que conserva el número total de excitaciones en el sistema, es decir:

$$[\hat{H}, \hat{N}] = [\hat{H}, \hat{N}_\gamma + \hat{N}_\chi] = 0 \quad (8.2)$$

Para mostrar esto y hacer menos densa el álgebra considere un hamiltoniano análogo al modelo *SSH* pero que cuenta sólo con un sitio por celda unitaria, se trabajará por separado con la parte del número total de excitaciones junto a su acoplamiento y el tunelaje entre celdas. Para la primera parte se tiene:

$$\hat{H}_{1a} = \omega_\gamma \hat{a}^\dagger \hat{a} + \omega_\chi \hat{\chi}^\dagger \hat{\chi} + \Omega (\hat{\chi}^\dagger \hat{a} + \hat{a}^\dagger \hat{\chi}) = \omega_\gamma \hat{N}_\gamma + \omega_\chi \hat{N}_\chi + \Omega (\hat{\chi}^\dagger \hat{a} + \hat{a}^\dagger \hat{\chi})$$

El número total de excitaciones del sistema está dado por:

$$\hat{N} = \hat{N}_\gamma + \hat{N}_\chi = \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{\chi}^\dagger \hat{\chi} \quad (8.3)$$

El conmutador del hamiltoniano  $\hat{H}_{1a}$  con el número total de excitaciones es:

$$\begin{aligned} [\hat{H}_{1a}, \hat{N}] &= [\omega_\gamma \hat{N}_\gamma + \omega_\chi \hat{N}_\chi + \Omega (\hat{\chi}^\dagger \hat{a} + \hat{a}^\dagger \hat{\chi}), \hat{N}_\gamma + \hat{N}_\chi] = \\ &\omega_\gamma [\hat{N}_\gamma, \hat{N}_\gamma + \hat{N}_\chi] + \omega_\chi [\hat{N}_\chi, \hat{N}_\gamma + \hat{N}_\chi] + \Omega [\hat{\chi}^\dagger \hat{a}, \hat{N}_\gamma + \hat{N}_\chi] + \Omega [\hat{a}^\dagger \hat{\chi}, \hat{N}_\gamma + \hat{N}_\chi] = \\ &\omega_\gamma [\hat{N}_\gamma, \hat{N}_\gamma] + \omega_\gamma [\hat{N}_\gamma, \hat{N}_\chi] + \omega_\chi [\hat{N}_\chi, \hat{N}_\gamma] + \omega_\chi [\hat{N}_\chi, \hat{N}_\chi] + \Omega [\hat{\chi}^\dagger \hat{a}, \hat{N}_\gamma] \\ &\quad + \Omega [\hat{\chi}^\dagger \hat{a}, \hat{N}_\chi] + \Omega [\hat{a}^\dagger \hat{\chi}, \hat{N}_\gamma] + \Omega [\hat{a}^\dagger \hat{\chi}, \hat{N}_\chi] \end{aligned}$$

Ya que los operadores excitónicos y fotónicos obedecen a las reglas de conmutación bosónica se puede probar que:

$$\begin{aligned} [\hat{N}_\gamma, \hat{N}_\gamma] &= 0 \\ [\hat{N}_\chi, \hat{N}_\chi] &= 0 \\ [\hat{N}_\gamma, \hat{N}_\chi] &= 0 \\ [\hat{N}_\chi, \hat{N}_\gamma] &= 0 \end{aligned}$$

Entonces:

$$\begin{aligned} [\hat{H}_{1a}, \hat{N}] &= \Omega [\hat{\chi}^\dagger \hat{a}, \hat{N}_\gamma] + \Omega [\hat{\chi}^\dagger \hat{a}, \hat{N}_\chi] + \Omega [\hat{a}^\dagger \hat{\chi}, \hat{N}_\gamma] + \Omega [\hat{a}^\dagger \hat{\chi}, \hat{N}_\chi] = \\ &\Omega \chi^\dagger [\hat{a}, \hat{N}_\gamma] + \Omega [\hat{\chi}^\dagger, \hat{N}_\gamma] \hat{a} + \Omega \hat{\chi}^\dagger [\hat{a}, \hat{N}_\chi] + \Omega [\hat{\chi}^\dagger, \hat{N}_\chi] \hat{a} \\ &+ \Omega \hat{a}^\dagger [\hat{\chi}, \hat{N}_\gamma] + \Omega [\hat{a}^\dagger, \hat{N}_\gamma] \hat{\chi} + \Omega \hat{a}^\dagger [\hat{\chi}, \hat{N}_\chi] + \Omega [\hat{a}^\dagger, \hat{N}_\chi] \hat{\chi} \end{aligned}$$

También es posible probar que las siguientes relaciones se satisfacen:

$$[\hat{a}, \hat{N}_\gamma] = \hat{a}$$

$$[\hat{a}^\dagger, \hat{N}_\gamma] = -\hat{a}^\dagger$$

$$[\hat{\chi}, \hat{N}_\chi] = \hat{\chi}$$

$$[\hat{\chi}^\dagger, \hat{N}_\chi] = -\hat{\chi}^\dagger$$

$$[\hat{\chi}, \hat{N}_\gamma] = 0$$

$$[\hat{\chi}^\dagger, \hat{N}_\gamma] = 0$$

$$[\hat{a}, \hat{N}_\chi] = 0$$

$$[\hat{a}^\dagger, \hat{N}_\chi] = 0$$

Entonces el conmutador es:

$$[\hat{H}_{1a}, \hat{N}] = \Omega \chi^\dagger \hat{a} - \Omega \chi^\dagger \hat{a} - \Omega \hat{a}^\dagger \hat{\chi} + \Omega \hat{a}^\dagger \hat{\chi} = 0$$

Ahora, para el tunelaje de los fotones el hamiltoniano es:

$$\hat{H}_{2a} = -t \sum_{i=1}^N (\hat{a}_{i+1}^\dagger \hat{a}_i + \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_{i+1})$$

En este caso el número total de excitaciones es:

$$\hat{N} = \hat{N}_\gamma = \sum_{j=1}^N \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j$$

El conmutador queda como:

$$\begin{aligned}
[\hat{H}_{2a}, \hat{N}] &= -t \sum_{i,j}^N [\hat{a}_{i+1}^\dagger \hat{a}_i + \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_{i+1}, \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j] = \\
&= -t \sum_{i,j}^N [\hat{a}_{i+1}^\dagger \hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j] + [\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_{i+1}, \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j] = \\
&= -t \sum_{i,j}^N (\hat{a}_{i+1}^\dagger [\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] \hat{a}_j + [\hat{a}_{i+1}^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] \hat{a}_i \hat{a}_j + \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{i+1}^\dagger [\hat{a}_i, \hat{a}_j] + \hat{a}_j^\dagger [\hat{a}_{i+1}^\dagger, \hat{a}_j] \hat{a}_i + \\
&\quad \hat{a}_i^\dagger [\hat{a}_{i+1}, \hat{a}_j^\dagger] \hat{a}_j + [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] \hat{a}_{i+1} \hat{a}_j + \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i^\dagger [\hat{a}_{i+1}, \hat{a}_j] + \hat{a}_j^\dagger [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j] \hat{a}_{i+1})
\end{aligned}$$

Nuevamente, debido a las reglas de conmutación bosónicas que concluye que:

$$[\hat{H}_{2a}, \hat{N}] = 0$$

Ya que el modelo *SSH* es una extensión del hamiltoniano  $\hat{H}_{1a} + \hat{H}_{2a}$  entonces se deduce que este también conserva el número total de excitaciones. Con lo anterior en mente, para encontrar las energías propias se propone la siguiente base que está restringida a una sola excitación en el sistema:

$$\begin{aligned}
|1\rangle &= |1_{\chi,A}^1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, \dots, 0\rangle, \\
|2\rangle &= |0, 1_{\gamma,A}^1, 0, 0, 0, 0, 0, \dots, 0\rangle, \\
|3\rangle &= |0, 0, 1_{\chi,B}^1, 0, 0, 0, 0, \dots, 0\rangle, \\
|4\rangle &= |0, 0, 0, 1_{\gamma,B}^1, 0, 0, 0, \dots, 0\rangle, \\
|5\rangle &= |0, 0, 0, 0, 1_{\chi,A}^2, 0, 0, \dots, 0\rangle, \\
|6\rangle &= |0, 0, 0, 0, 0, 1_{\gamma,A}^2, 0, \dots, 0\rangle, \\
|7\rangle &= |0, 0, 0, 0, 0, 0, 1_{\chi,B}^2, \dots, 0\rangle, \\
|8\rangle &= |0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1_{\gamma,B}^2, \dots, 0\rangle.
\end{aligned}$$

De acuerdo a cómo se construyó la base se tiene la posibilidad de hacer las siguientes observaciones:

- Los excitones en el sitio *A* se encuentran en los kets  $|1\rangle, |5\rangle, |9\rangle, \dots$  en una celda *i* cualquiera.
- Los excitones en el sitio *B* se encuentran en los kets  $|3\rangle, |7\rangle, |11\rangle, \dots$  en una celda *i* cualquiera.
- Los fotones en el sitio *A* se encuentran en los kets  $|2\rangle, |6\rangle, |10\rangle, \dots$  en una celda *i* cualquiera.

- Los fotones en el sitio  $B$  se encuentran en los kets  $|4\rangle, |8\rangle, |12\rangle, \dots$  en una celda  $i$  cualquiera.

Una generalización de las observaciones anteriores permite declarar las siguientes afirmaciones:

- A los excitones en el sitio A les corresponde el ket  $|4n - 3\rangle$
- A los excitones en el sitio B les corresponde el ket  $|4n - 1\rangle$
- A los fotones en el sitio A les corresponde el ket  $|4n - 2\rangle$
- A los fotones en el sitio B les corresponde el ket  $|4n\rangle$

Ahora se procede a encontrar los elementos de matriz del hamiltoniano del modelo SSH con la base presentada, para ello se toma el hamiltoniano "por partes":

$$\hat{H}^{(1)}|n\rangle = \sum_{i=1}^N \omega_\gamma(\theta) \left( \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i |n\rangle + \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i |n\rangle \right). \quad (8.4)$$

De acuerdo a las reglas de los operadores de creación y aniquilación se tiene:

$$\hat{H}^{(1)}|n\rangle = \sum_{i=1}^N \omega_\gamma(\theta) (\delta_{4i-2,n} |n\rangle + \delta_{4i,n} |n\rangle). \quad (8.5)$$

De una forma completamente análoga para las demás partes del hamiltoniano se obtiene:

$$\hat{H}^{(2)}|n\rangle = \sum_{i=1}^N \omega_\chi \left( \hat{\chi}_{i,A}^\dagger \hat{\chi}_{i,A} |n\rangle + \hat{\chi}_{i,B}^\dagger \hat{\chi}_{i,B} |n\rangle \right), \quad (8.6)$$

$$\hat{H}^{(2)}|n\rangle = \sum_{i=1}^N \omega_\chi (\delta_{4i-3,n} |n\rangle + \delta_{4i-1,n} |n\rangle). \quad (8.7)$$

$$\hat{H}^{(3)}|n\rangle = \Omega \sum_{i=1}^N \left( \hat{a}_i^\dagger \hat{\chi}_{i,A} |n\rangle + \hat{b}_i^\dagger \hat{\chi}_{i,B} |n\rangle + \hat{\chi}_{i,A}^\dagger \hat{a}_i |n\rangle + \hat{\chi}_{i,B}^\dagger \hat{b}_i |n\rangle \right), \quad (8.8)$$

$$\hat{H}^{(3)}|n\rangle = \Omega \sum_{i=1}^N (\delta_{4i-3,n} |4i-2\rangle + \delta_{4i-1,n} |4i\rangle + \delta_{4i-2,n} |4i-3\rangle + \delta_{4i,n} |4i-1\rangle). \quad (8.9)$$

$$\hat{H}^{(4)}|n\rangle = - \sum_{i=1}^N v \left( \hat{a}_i^\dagger \hat{b}_i |n\rangle + \hat{b}_i^\dagger \hat{a}_i |n\rangle \right), \quad (8.10)$$

$$\hat{H}^{(4)}|n\rangle = - \sum_{i=1}^N v (\delta_{4i,n} |4i-2\rangle + \delta_{4i-2,n} |4i\rangle). \quad (8.11)$$

$$\hat{H}^{(5)}|n\rangle = - \sum_{i=1}^N w \left( \hat{a}_{i+1}^\dagger \hat{b}_i |n\rangle + \hat{b}_i^\dagger \hat{a}_{i+1} |n\rangle \right), \quad (8.12)$$

$$\hat{H}^{(5)}|n\rangle = - \sum_{i=1}^N w \left( \delta_{4i,n} |4i+2\rangle + \delta_{4i+2,n} |4i\rangle \right). \quad (8.13)$$

Aplicando el bra  $\langle n'|$  a los resultados anteriores y uniéndolos se tiene que los elementos de matriz del hamiltoniano del modelo SSH son:

$$\begin{aligned} \langle n' | \hat{H} | n \rangle &= \sum_{i=1}^N (\omega_\gamma(\theta) (\delta_{4i-2,n} \delta_{n,n'} + \delta_{4i,n} \delta_{n,n'})) + \omega_\chi (\delta_{4i-3,n} \delta_{n,n'} + \delta_{4i-1,n} \delta_{n,n'}) \\ &+ \Omega (\delta_{4i-3,n} \delta_{4i-2,n'} + \delta_{4i-1,n} \delta_{4i,n'} + \delta_{4i-2,n} \delta_{4i-3,n'} + \delta_{4i,n} \delta_{4i-1,n'}) \\ &- v (\delta_{4i,n} \delta_{4i-2,n'} + \delta_{4i-2,n} \delta_{4i,n'}) - w (\delta_{4i,n} \delta_{4i+2,n'} + \delta_{4i+2,n} \delta_{4i,n'}). \end{aligned} \quad (8.14)$$

Entonces su representación matricial es:

$$\langle n' | \hat{H} | n \rangle = \begin{pmatrix} \omega_\chi & \Omega & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \Omega & \omega_\gamma(\theta) & 0 & -v & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \omega_\chi & \Omega & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & -v & \Omega & \omega_\gamma(\theta) & 0 & -w & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \omega_\chi & \Omega & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -w & \Omega & \omega_\gamma(\theta) & 0 & -v & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \omega_\chi & \Omega \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -v & \Omega & \omega_\gamma(\theta) \\ \vdots & & & \vdots & & \vdots & & \ddots \end{pmatrix}. \quad (8.15)$$

Se agregarán los operadores de creación y aniquilación de fotones y excitones para enfatizar el ordenamiento de la matriz hamiltoniana.

$$\begin{array}{c}
 \hat{\chi}_{1,A}^\dagger \\
 \hat{a}_1^\dagger \\
 \hat{\chi}_{1,B}^\dagger \\
 \hat{b}_1^\dagger \\
 \hat{\chi}_{2,A}^\dagger \\
 \hat{a}_2^\dagger \\
 \hat{\chi}_{2,B}^\dagger \\
 \hat{b}_2^\dagger \\
 \vdots
 \end{array}
 \begin{pmatrix}
 \hat{\chi}_{1,A} & \hat{a}_1 & \hat{\chi}_{1,B} & \hat{b}_1 & \hat{\chi}_{2,A} & \hat{a}_2 & \hat{\chi}_{2,B} & \hat{b}_2 & \cdots \\
 \omega_\chi & \Omega & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \\
 \Omega & \omega_\gamma(\theta) & 0 & -v & 0 & 0 & 0 & 0 & \\
 0 & 0 & \omega_\chi & \Omega & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\
 0 & -v & \Omega & \omega_\gamma(\theta) & 0 & -w & 0 & 0 & \\
 0 & 0 & 0 & 0 & \omega_\chi & \Omega & 0 & 0 & \\
 0 & 0 & 0 & -w & \Omega & \omega_\gamma(\theta) & 0 & -v & \cdots \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \omega_\chi & \Omega & \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -v & \Omega & \omega_\gamma(\theta) & \\
 \vdots & \ddots
 \end{pmatrix}. \quad (8.16)$$

El ordenamiento de los renglones y las columnas es muy intuitivo ya que en su intersección se encuentran las cantidades que les relacionan, por ejemplo; la intersección del renglón de  $\hat{\chi}_{1,A}^\dagger$  con  $\hat{\chi}_{1,A}$  da como resultado la energía propia del excitón, la intersección del renglón  $\hat{b}_1^\dagger$  con  $\hat{\chi}_{1,B}$  da como resultado la cantidad que mide su acoplamiento, etc.

Para encontrar las energías propias del hamiltoniano, se dan valores a los coeficientes presentados [6]:

- $\omega_\chi = 2.32eV$ : Valor obtenido experimentalmente.
- $\omega_\gamma(\theta = 0) = 2.32eV$ : Se toma incidencia normal y en condiciones de resonancia con el excitón.
- $\Omega = 0.165eV$ : Valor obtenido experimentalmente.
- $v = 0.15eV$  &  $w = 0.09eV$ : Valores obtenidos al ajustar los datos. Se considera el caso primero para la configuración trivial, para la topológica sólo se intercambian los valores, es decir  $v = 0.09eV$  &  $w = 0.15eV$

Al graficar los valores propios considerando  $N = 10$  en el hamiltoniano, es decir, 20 cavidades (véase la nota al final de la sección 11) se obtiene:

### Configuración trivial

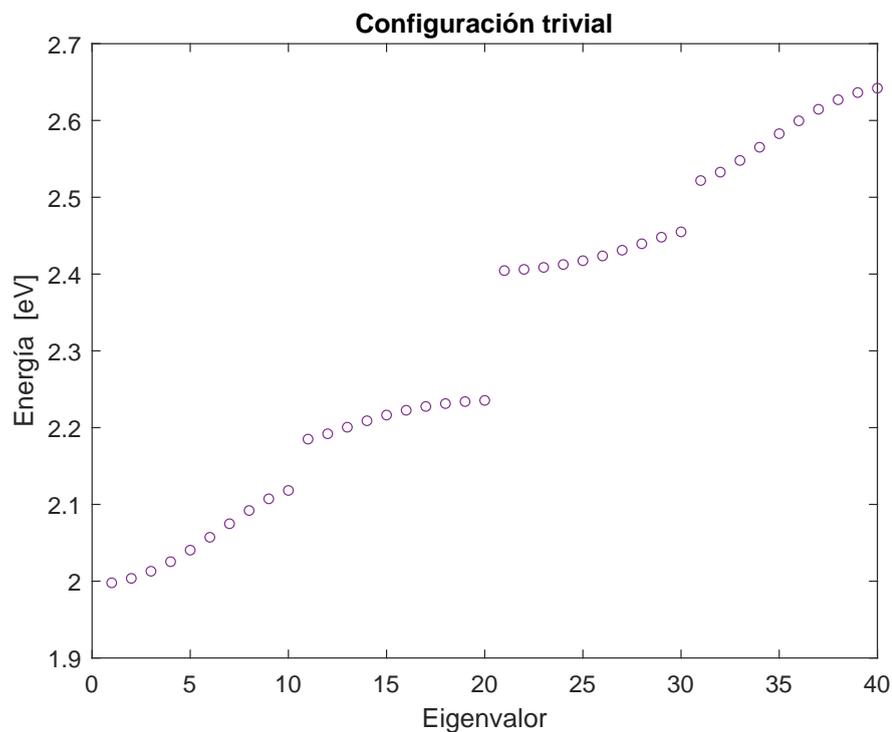


Figura 18: Bandas de energías propias de la configuración trivial. Pueden apreciarse cuatro bandas polaritónicas que coinciden con las bandas de los patrones de reflectancia en incidencia normal, entre la banda superior del *lower polariton* y la inferior del *upper polariton* hay una diferencia de  $2\Omega = 0.33eV$ .

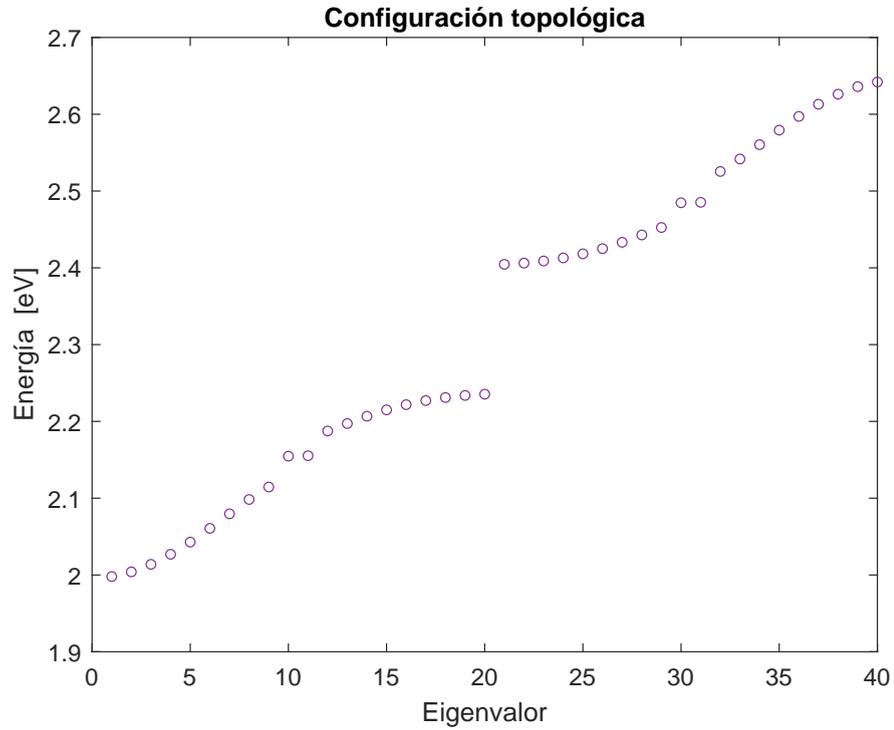
*Configuración topológica*

Figura 19: Bandas de energías propias de la configuración topológica. Adicional a las características de la configuración pasada se puede observar la aparición de un par de estados degenerados de energía justo en los valores de  $2.155eV$  y  $2.485eV$ .

De las gráficas anteriores podemos concluir que el modelo SSH coincide con los patrones de reflectancia obtenidos con la matriz de transferencia con bastante precisión pues, considerando incidencia normal, las bandas de energía del hamiltoniano se empalman con las bandas de mínima reflectancia de las figuras 10 y 11.

Nótese que la única diferencia entre las dos configuraciones es la aparición de un par de estados degenerados en la configuración topológica con energías de  $2.155eV$  y  $2.485eV$ .

Ahora, como se tienen expresiones analíticas para las energías de los polaritones, considerando una sola cavidad y los valores de energías propias presentados con anterioridad se puede obtener:

$$\omega_{UP} = \frac{\omega_{\gamma} + \omega_{\chi} + \sqrt{(\omega_{\gamma} - \omega_{\chi})^2 + 4\Omega^2}}{2} = 2.485eV, \quad (8.17)$$

$$\omega_{LP} = \frac{\omega_{\gamma} + \omega_{\chi} - \sqrt{(\omega_{\gamma} - \omega_{\chi})^2 + 4\Omega^2}}{2} = 2.155eV. \quad (8.18)$$

Entonces los estados degenerados que aparecen en la figura 19 son los correspondientes a las energías propias de una sola cavidad. El porqué de la aparición de las 4 bandas y los estados degenerados quedará claro en las siguientes secciones.

## 9. Topología del modelo SSH

Como se estudió previamente, los polaritones pueden ser visualizados como una combinación lineal de los excitones y los fotones. Matemáticamente entonces es posible escribir a los operadores de creación y aniquilación de los excitones y fotones en términos de los operadores de los polaritones, es decir:

$$\hat{a}^\dagger = \mathcal{C}\hat{U}^\dagger - \mathcal{S}\hat{L}^\dagger, \quad (9.1)$$

$$\chi^\dagger = \mathcal{S}\hat{U}^\dagger + \mathcal{C}\hat{L}^\dagger. \quad (9.2)$$

Donde se han reescrito a los coeficientes de *Hopfield* como:  $\cos\theta \rightarrow \mathcal{C}$  y  $\sin\theta \rightarrow \mathcal{S}$  para facilitar la notación.

El primer término de tunelaje del modelo *SSH* se expresa como:

$$\begin{aligned} & - \sum_{l=1}^N v (\hat{a}_l^\dagger \hat{b}_l + \hat{b}_l^\dagger \hat{a}_l) = \\ & - \sum_{l=1}^N v (\mathcal{C}_{l,A} \hat{U}_{l,A}^\dagger - \mathcal{S}_{l,A} \hat{L}_{l,A}^\dagger) (\mathcal{C}_{l,B} \hat{U}_{l,B} - \mathcal{S}_{l,B} \hat{L}_{l,B}) \\ & - \sum_{l=1}^N v (\mathcal{C}_{l,B} \hat{U}_{l,B}^\dagger - \mathcal{S}_{l,B} \hat{L}_{l,B}^\dagger) (\mathcal{C}_{l,A} \hat{U}_{l,A} - \mathcal{S}_{l,A} \hat{L}_{l,A}). \end{aligned}$$

Es posible despreciar los términos cruzados entre operadores de polaritones *upper* y *lower* debido a que el acoplamiento luz-materia es mayor que los términos de tunelaje, es decir:  $2\Omega \gg v, w$ , entonces en términos de los operadores de polaritones:

$$\begin{aligned} - \sum_{l=1}^N v (\hat{a}_l^\dagger \hat{b}_l + \hat{b}_l^\dagger \hat{a}_l) & \rightarrow - \sum_{l=1}^N v \mathcal{C}_{l,A} \mathcal{C}_{l,B} (\hat{U}_{l,A}^\dagger \hat{U}_{l,B} + \hat{U}_{l,B}^\dagger \hat{U}_{l,A}) \\ & - \sum_{l=1}^N v \mathcal{S}_{l,A} \mathcal{S}_{l,B} (\hat{L}_{l,A}^\dagger \hat{L}_{l,B} + \hat{L}_{l,B}^\dagger \hat{L}_{l,A}). \end{aligned}$$

Mediante un razonamiento similar el segundo término de tunelaje queda como:

$$\begin{aligned}
 -\sum_{l=1}^N w \left( \hat{a}_{l+1}^\dagger \hat{b}_l + \hat{b}_l^\dagger \hat{a}_{l+1} \right) &\rightarrow -\sum_{l=1}^N w \mathcal{C}_{l+1,A} \mathcal{C}_{l,B} \left( \hat{U}_{l+1,A}^\dagger \hat{U}_{l,B} + \hat{U}_{l,B}^\dagger \hat{U}_{l+1,A} \right) \\
 &- \sum_{l=1}^N w \mathcal{S}_{l+1,A} \mathcal{S}_{l,B} \left( \hat{L}_{l+1,A}^\dagger \hat{L}_{l,B} + \hat{L}_{l,B}^\dagger \hat{L}_{l+1,A} \right).
 \end{aligned}$$

Por simplicidad a partir de ahora sólo se trabajará con un solo polaritón para mostrar las propiedades topológicas del modelo, considérese entonces el hamiltoniano siguiente:

$$\hat{H}_U = -\sum_{l=1}^N v \mathcal{C}_{l,A} \mathcal{C}_{l,B} \left( \hat{U}_{l,A}^\dagger \hat{U}_{l,B} + \hat{U}_{l,B}^\dagger \hat{U}_{l,A} \right) - \sum_{l=1}^N w \mathcal{C}_{l+1,A} \mathcal{C}_{l,B} \left( \hat{U}_{l+1,A}^\dagger \hat{U}_{l,B} + \hat{U}_{l,B}^\dagger \hat{U}_{l+1,A} \right).$$

Ya que se tienen condiciones de resonancia, entonces  $\mathcal{C}_{l,A} = \mathcal{C}_{l,B} = \frac{1}{\sqrt{2}}$ , ahora se procede a agrupar las constantes para simplificar la escritura del hamiltoniano:

$$\hat{H}_U = -\sum_{l=1}^N v \left( \hat{U}_{l,A}^\dagger \hat{U}_{l,B} + \hat{U}_{l,B}^\dagger \hat{U}_{l,A} \right) - \sum_{l=1}^N w \left( \hat{U}_{l+1,A}^\dagger \hat{U}_{l,B} + \hat{U}_{l,B}^\dagger \hat{U}_{l+1,A} \right). \quad (9.3)$$

Al tomar la transformada de *Fourier* de los operadores del upper polariton se obtiene:

$$\begin{aligned}
 \hat{U}_k &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l^N e^{-ikdl} \hat{U}_l, \\
 \hat{U}_k^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l^N e^{ikdl} \hat{U}_l^\dagger.
 \end{aligned}$$

O de forma equivalente:

$$\begin{aligned}
 \hat{U}_l &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k^N e^{ikdl} \hat{U}_k, \\
 \hat{U}_l^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k^N e^{-ikdl} \hat{U}_k^\dagger.
 \end{aligned}$$

El hamiltoniano  $\hat{H}_U$  en el espacio recíproco es:

$$\begin{aligned} \hat{H}_U = & - \sum_{l=1}^N v \left( \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikdl} \hat{U}_{k,A}^\dagger \right) \left( \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} e^{ik'dl} \hat{U}_{k',B} \right) \\ & - \sum_{l=1}^N v \left( \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikdl} \hat{U}_{k,B}^\dagger \right) \left( \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} e^{ik'dl} \hat{U}_{k',A} \right) \\ & - \sum_{i=1}^N w \left( \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikd(l+1)} \hat{U}_{k,A}^\dagger \right) \left( \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} e^{ik'dl} \hat{U}_{k',B} \right) \\ & - \sum_{i=1}^N w \left( \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikdl} \hat{U}_{k,B}^\dagger \right) \left( \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} e^{ik'd(l+1)} \hat{U}_{k',A} \right). \end{aligned}$$

Al simplificar se obtiene:

$$\begin{aligned} \hat{H}_U = & - \sum_{l=1}^N v \left( \frac{1}{N} \sum_{k,k'} e^{idl(k'-k)} \hat{U}_{k,A}^\dagger \hat{U}_{k',B} + \frac{1}{N} \sum_{k,k'} e^{idl(k'-k)} \hat{U}_{k,B}^\dagger \hat{U}_{k',A} \right) \\ & - \sum_{i=1}^N w \left( \frac{1}{N} \sum_{k,k'} e^{idl(k'-k)} e^{-ikd} \hat{U}_{k,A}^\dagger \hat{U}_{k',B} + \frac{1}{N} \sum_{k,k'} e^{idl(k'-k)} e^{ik'd} \hat{U}_{k,B}^\dagger \hat{U}_{k',A} \right), \\ \hat{H}_U = & - \sum_{k=1}^N v \left( \hat{U}_{k,A}^\dagger \hat{U}_{k,B} + \hat{U}_{k,B}^\dagger \hat{U}_{k,A} \right) - \sum_{k=1}^N w \left( e^{-ikd} \hat{U}_{k,A}^\dagger \hat{U}_{k,B} + e^{ikd} \hat{U}_{k,B}^\dagger \hat{U}_{k,A} \right). \quad (9.4) \end{aligned}$$

Llevando este hamiltoniano a una forma matricial se tiene [11]:

$$\hat{H}_U = - \sum_k \begin{pmatrix} \hat{U}_{k,A}^\dagger & \hat{U}_{k,B}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & v + we^{-ikd} \\ v + we^{ikd} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{U}_{k,A} \\ \hat{U}_{k,B} \end{pmatrix}. \quad (9.5)$$

Es fácil mostrar que las energías propias están dadas por:

$$\mathcal{E}_\pm = \pm \sqrt{v^2 + w^2 + 2vw \cos kd}. \quad (9.6)$$

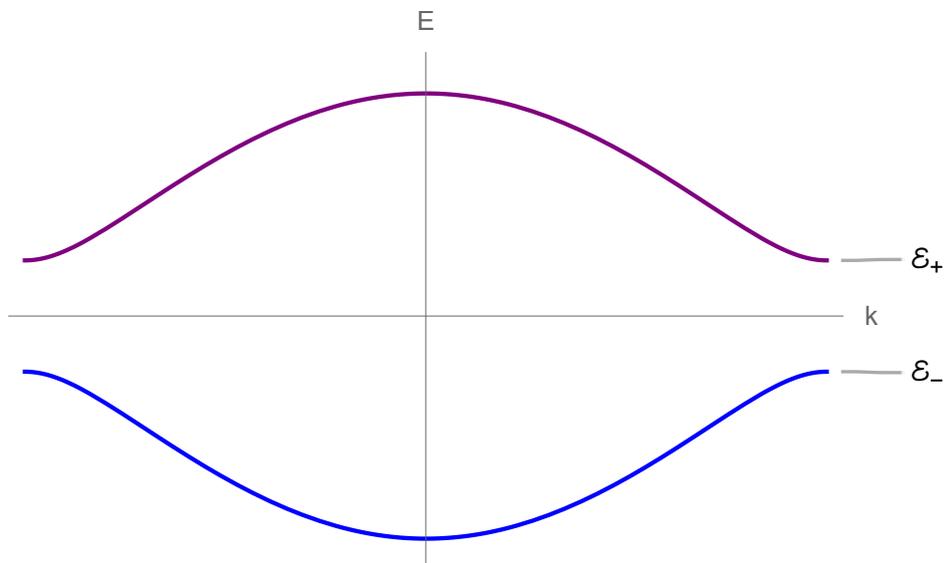


Figura 20: Energías propias de  $\hat{H}_U$  considerando  $v < w$  o  $v > w$

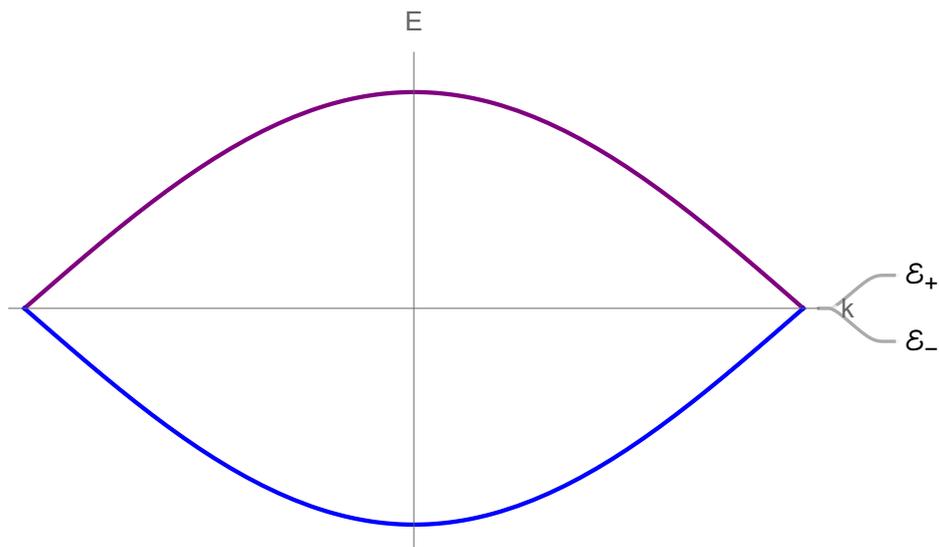


Figura 21: Energías propias de  $\hat{H}_U$  considerando  $v = w$

En las figuras 20 y 21 puede verse que hay un par de bandas de energía para el *upper polariton* y por ende también habrá otro par para el *lower polariton*, he aquí el porqué aparecen cuatro bandas polaritónicas en los patrones de reflectancia.

Ahora se escribe la matriz hamiltoniana de una forma diferente:

$$H_U = \begin{pmatrix} 0 & v + we^{-ikd} \\ v + we^{ikd} & 0 \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} 0 & v + w \cos kd - iw \sin kd \\ v + w \cos kd + iw \sin kd & 0 \end{pmatrix}.$$

Ya que las matrices de *Pauli* son:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Entonces la matriz hamiltoniana para cada valor de momento  $k$  es:

$$H_U = ((v + w \cos kd)\sigma_x + (w \sin kd)\sigma_y + (0)\sigma_z). \quad (9.7)$$

Al definir las cantidades  $d_x(k) \equiv v + w \cos kd$ ,  $d_y(k) \equiv w \sin kd$  y  $d_z(k) \equiv 0$  entonces:

$$H_U = d_x(k)\sigma_x + d_y(k)\sigma_y + d_z(k)\sigma_z. \quad (9.8)$$

Considerando ahora el plano formado por los ejes  $d_x$  y  $d_y$ , es claro que las siguientes relaciones son coordenadas polares que describen una circunferencia como se ilustra más adelante:

$$d_x = v + w \cos kd, \quad (9.9)$$

$$d_y = w \sin kd. \quad (9.10)$$

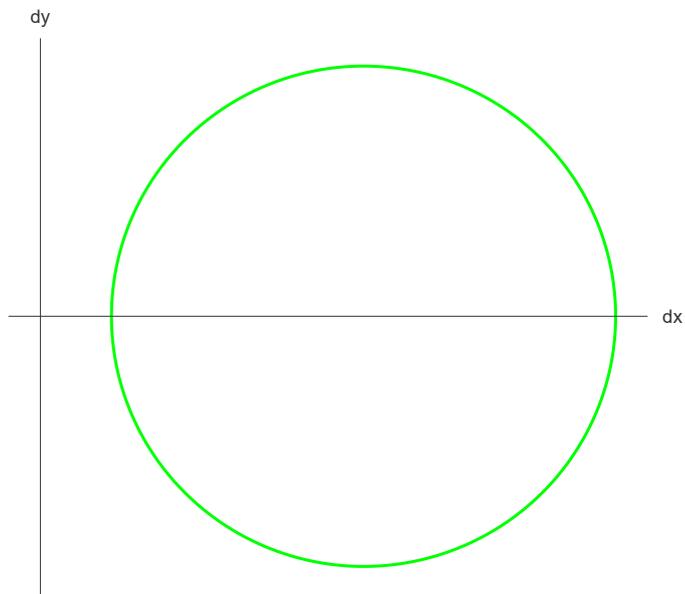


Figura 22: Circunferencia en el plano  $d_x - d_y$  considerando  $v > w$  (configuración trivial)

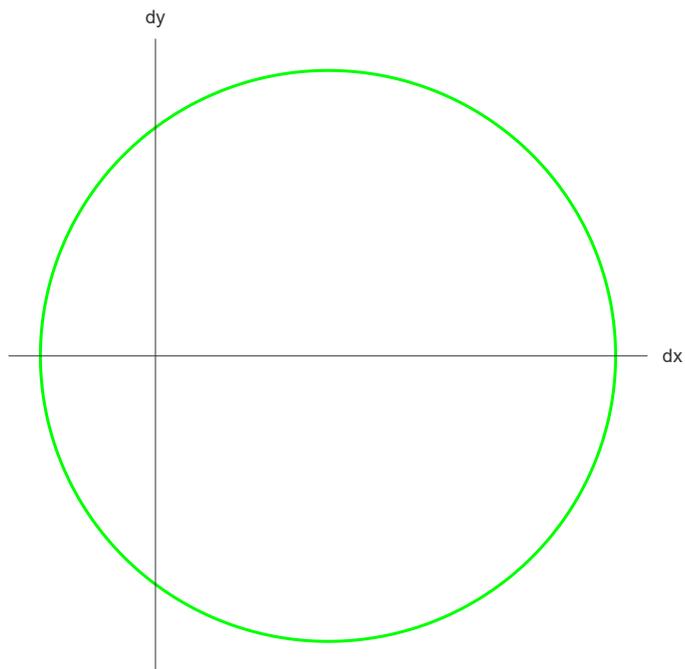


Figura 23: Circunferencia en el plano  $d_x - d_y$  considerando  $v < w$  (configuración topológica)

Ahora, para hacer explícitas las propiedades topológicas del modelo SSH se introduce el invariante topológico siguiente:

$$\mathcal{W}_{\mathcal{N}} \equiv \frac{1}{2\pi i} \int_{-\pi}^{\pi} dk \frac{d}{dk} \ln|h(k)|. \quad (9.11)$$

Donde  $h(k) = d_x(k) - id_y(k)$ .

A la cantidad denotada como  $\mathcal{W}_{\mathcal{N}}$  se le conoce como *winding number* la cual delata la naturaleza topológica de algunos sistemas [11]. Una forma intuitiva y equivalente a la ecuación 9.11 de calcular su valor es la siguiente:

- Sea una curva cerrada  $\gamma : [\alpha, \beta] \rightarrow \mathbb{R}$ , se debe de colorear el "interior" de rojo y el "exterior" de azul.
- Trazar una curva  $\mathcal{C}$  que vaya desde el origen del plano y se extienda hasta el infinito.
- Por cada vez que la curva  $\mathcal{C}$  corte "por primera vez" a  $\gamma$  por el lado rojo se sumará una unidad a  $\mathcal{W}_{\mathcal{N}}$  y si lo hace por el lado azul se restará una unidad.
- El *winding number* será el resultado total del número de cortes.

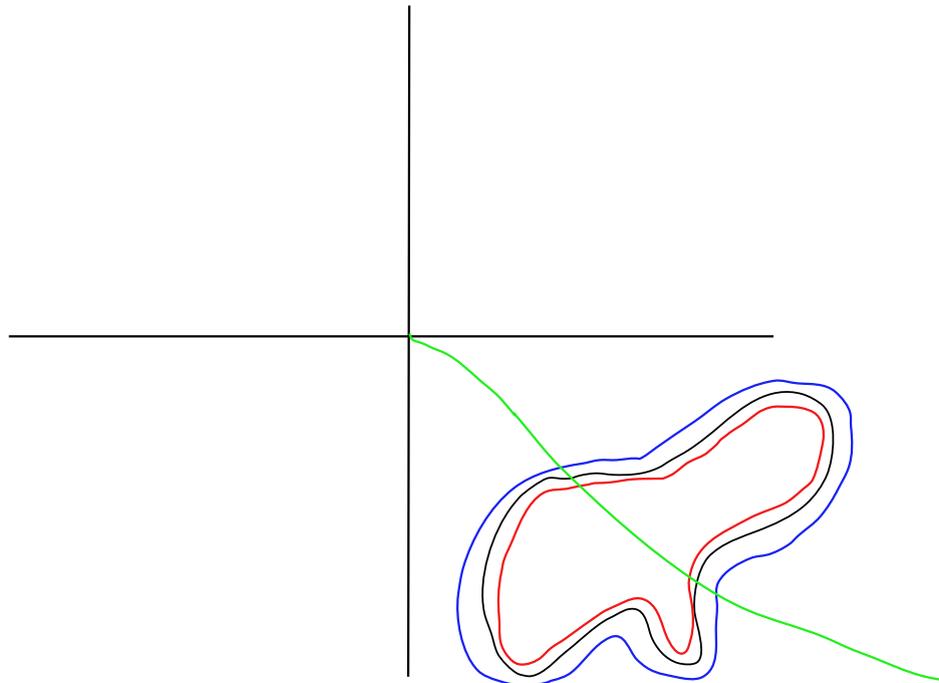


Figura 24: Ejemplo del cálculo del *winding number*: Ya que la curva verde cruza "por primera vez" el lado azul se resta una unidad, posteriormente se cruza primero por el lado rojo lo que suma una unidad dando como resultado final  $\mathcal{W}_{\mathcal{N}} = 0$

En la siguiente figura se muestra que la configuración trivial tiene como invariante topológico  $\mathcal{W}_{\mathcal{N}} = 0$  (topológicamente trivial) mientras que la configuración topológica tiene  $\mathcal{W}_{\mathcal{N}} = 1$  (topológicamente no trivial).

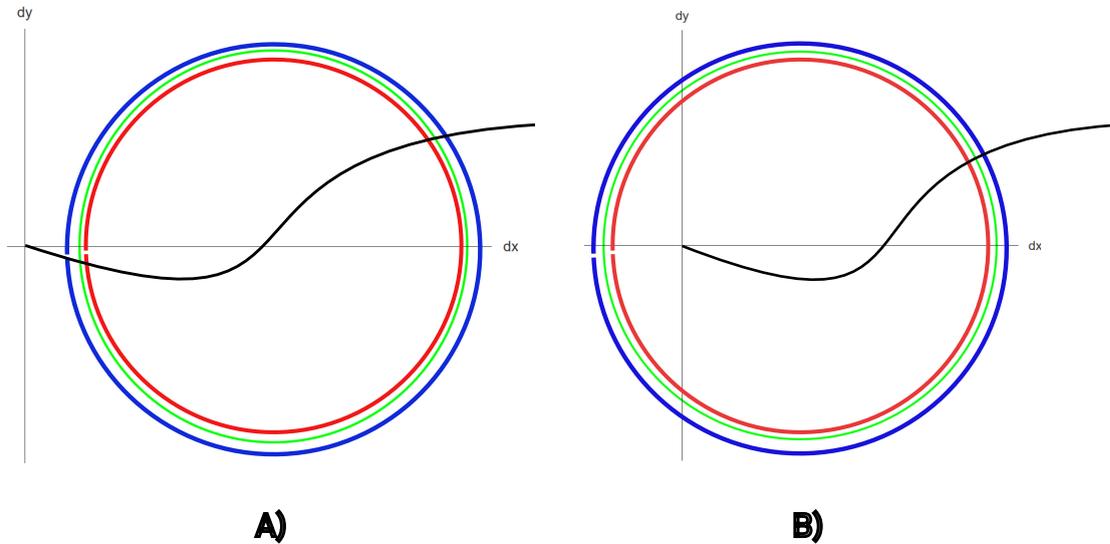


Figura 25: A) En la configuración trivial puede apreciarse que una curva cualquiera que parte del origen corta por "por primera vez" a la circunferencia por el lado azul ( $-1$ ) y posteriormente por el lado rojo ( $+1$ ) dando como resultado  $\mathcal{W}_{\mathcal{N}} = 0$ . B) En la configuración topológica una curva cualquiera corta solamente a la circunferencia por el lado rojo ( $+1$ ) dando como resultado  $\mathcal{W}_{\mathcal{N}} = 1$

Se concluye entonces que no es posible ir de una configuración a otra mediante una serie de cambios continuos de los parámetros  $v$  y  $w$ , es por esta razón que se dice que son *topológicamente invariantes* (ya que se les está asociando un invariante topológico). Comparando las figuras 20, 21, 22 y 23 se nota que no se puede cambiar del arreglo trivial al topológico sin "cerrar" las bandas de energía del espacio recíproco.

## 10. Polarización del modelo SSH

Ahora se escribe el hamiltoniano del modelo SSH en notación de Dirac.

$$\hat{H} = -v \sum_{i=1}^N (|i, B\rangle\langle i, A| + |i, A\rangle\langle i, B|) - w \sum_{i=1}^N (|i+1, A\rangle\langle i, B| + |i, B\rangle\langle i+1, A|). \quad (10.1)$$

Se presenta al *operador quiral* que está definido como:

$$\hat{\Gamma} \equiv \hat{P}_A - \hat{P}_B. \quad (10.2)$$

Donde  $\hat{P}_A$  y  $\hat{P}_B$  son proyectores:  $\hat{P}_A = \sum_i |i, A\rangle\langle i, A|$  y  $\hat{P}_B = \sum_i |i, B\rangle\langle i, B|$ .

Algunas de las propiedades del operador quiral son:

$$\hat{\Gamma} = \hat{\Gamma}^\dagger, \quad (10.3)$$

$$\hat{\Gamma}^\dagger \hat{\Gamma} = \hat{I}. \quad (10.4)$$

Ahora, cuando este operador es aplicado a un hamiltoniano y satisface que:

$$\hat{\Gamma} \hat{H} \hat{\Gamma}^\dagger = -\hat{H}. \quad (10.5)$$

Se dice que posee simetría quiral [11], y mediante un poco de álgebra es posible verificar que en efecto el modelo SSH posee esta propiedad.

Una consecuencia de esto es que si  $|\Psi_m\rangle$  es un estado propio de  $\hat{H}$  entonces  $\hat{\Gamma}|\Psi_m\rangle$  también es estado propio de  $\hat{H}$  con energía  $-E_n$  lo cual se puede comprobar rápidamente:

$$\hat{H}|\Psi_m\rangle = E_n|\Psi_m\rangle,$$

$$-\hat{\Gamma}\hat{H}\hat{\Gamma}^\dagger|\Psi_m\rangle = E_m|\Psi_m\rangle,$$

$$-\hat{\Gamma}\hat{H}\hat{\Gamma}|\Psi_m\rangle = E_m|\Psi_m\rangle,$$

$$\hat{\Gamma}\hat{\Gamma}\hat{H}\hat{\Gamma}|\Psi_m\rangle = -E_m\hat{\Gamma}|\Psi_m\rangle,$$

$$\hat{\Gamma}^\dagger\hat{\Gamma}\hat{H}\hat{\Gamma}|\Psi_m\rangle = -E_m\hat{\Gamma}|\Psi_m\rangle,$$

$$\hat{H}\hat{\Gamma}|\Psi_m\rangle = -E_m\hat{\Gamma}|\Psi_m\rangle.$$

Lo anterior exhibe el hecho de que las energías del modelo SSH posean una pariedad definida. Ahora se procede a obtener el valor esperado de  $\hat{H}\hat{\Gamma}$ , para ello se tomará el bra del estado  $\Psi_m$ , es decir:

$$\langle\Psi_m|\hat{H}\hat{\Gamma}|\Psi_m\rangle = -\langle\Psi_m|\hat{\Gamma}\hat{H}|\Psi_m\rangle,$$

$$\langle\Psi_m|\hat{H}\hat{\Gamma}|\Psi_m\rangle = E_m\langle\Psi_m|\hat{\Gamma}|\Psi_m\rangle.$$

Además, como  $\langle\Psi_m|\hat{H}\hat{\Gamma}|\Psi_m\rangle = -E_m\langle\Psi_m|\hat{\Gamma}|\Psi_m\rangle$  entonces:

$$E_m\langle\Psi_m|\hat{\Gamma}|\Psi_m\rangle = -E_m\langle\Psi_m|\hat{\Gamma}|\Psi_m\rangle. \quad (10.6)$$

Por lo tanto:

$$2E_m\langle\Psi_m|\hat{\Gamma}|\Psi_m\rangle = 0. \quad (10.7)$$

Se tienen entonces dos opciones, la primera es:

$$E_m \neq 0 \quad \& \quad \langle\Psi_m|\hat{\Gamma}|\Psi_m\rangle = 0. \quad (10.8)$$

En esta elección no hay polarización, es decir, la probabilidad de encontrar al polaritón en el arreglo es uniforme, ya que:

$$\langle \Psi_m | \hat{\Gamma} | \Psi_m \rangle = 0 \iff \langle \Psi_m | \hat{P}_A | \Psi_m \rangle = \langle \Psi_m | \hat{P}_B | \Psi_m \rangle. \quad (10.9)$$

La segunda opción es:

$$E_m = 0 \quad \& \quad \langle \Psi_m | \hat{\Gamma} | \Psi_m \rangle \neq 0. \quad (10.10)$$

Aquí se tiene que en los estados de energía cero, es posible que haya polarización en el arreglo ya que:

$$\langle \Psi_m | \hat{\Gamma} | \Psi_m \rangle \neq 0 \iff \langle \Psi_m | \hat{\Gamma} | \Psi_m \rangle > 0 \quad \vee \quad \langle \Psi_m | \hat{\Gamma} | \Psi_m \rangle < 0. \quad (10.11)$$

Es decir, puede ocurrir que haya una preferencia en los sitios A o en los sitios B:

$$\langle \Psi_m | \hat{\Gamma} | \Psi_m \rangle > 0 \quad \rightarrow \quad \langle \Psi_m | \hat{P}_A | \Psi_m \rangle > \langle \Psi_m | \hat{P}_B | \Psi_m \rangle, \quad (10.12)$$

$$\langle \Psi_m | \hat{\Gamma} | \Psi_m \rangle < 0 \quad \rightarrow \quad \langle \Psi_m | \hat{P}_A | \Psi_m \rangle < \langle \Psi_m | \hat{P}_B | \Psi_m \rangle. \quad (10.13)$$

## 11. Discusión de resultados y conclusiones

Nuevamente se presenta el patrón de reflectancia correspondiente a una sola cavidad:

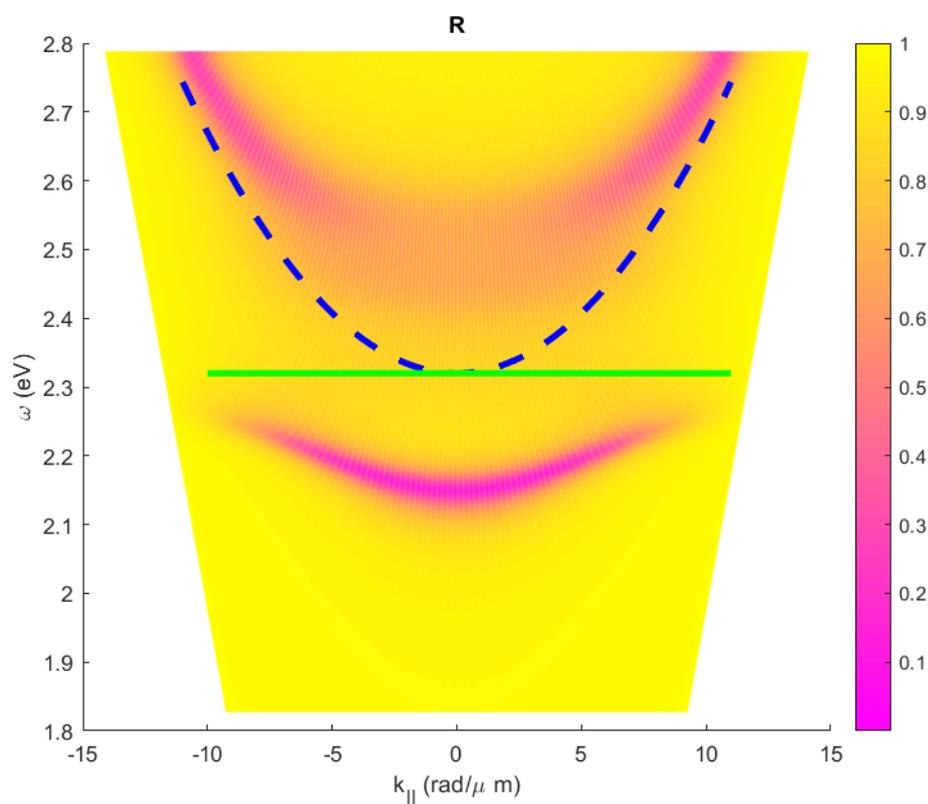


Figura 26: Patrón de reflectancia de una sola cavidad, la línea punteada corresponde a la dispersión del fotón mientras que la línea continua corresponde al máximo en la energía del excitón  $\approx 2.32eV$

Desde la perspectiva de los polaritones, la banda que se encuentra por encima de la energía del excitón (es decir, el máximo de absorción en el espectro de la *Eritrosina B*) es la energía propia del *upper polariton* mientras que la que está debajo es del *lower polariton*. Es importante acentuar el hecho de que en incidencia normal ( $k_{||} = 0$ ) las bandas polaritónicas tienen un valor aproximado de  $\approx 2.155eV$  y  $\approx 2.485eV$  (como ya se había calculado previamente).

Cabe mencionar que la claridad y grosor de estas bandas no son constantes; la del *lower polariton* se encuentra bien definida a ángulos pequeños pero al acercarse a ángulos grandes se va haciendo más delgada. Estas características pueden ser explicadas con los coeficientes de Hopfield pues estos dependen de la energía del fotón que, a su vez, depende del ángulo de incidencia, y ya que en estas gráficas se está variando dicho parámetro, los polaritones a veces son "más excitónicos o más fotónicos", cuando ocurre esto último

pueden propagarse mejor por el arreglo de cavidades y por ende, pueden ser visualizados con mayor facilidad en el patrón, esto también aclara el porqué cerca de la energía propia del excitón no hay bandas polaritónicas.

En la banda del *upper polariton* se puede apreciar una característica más y es que cerca de la incidencia normal está difuminada casi por completo, esto a causa de que el espectro de absorción de la *Eritrosina B* no es simétrico pues, como se puede ver en la gráfica 9, después del máximo de absorción en  $\approx 2.32eV$  hay una serie de excitaciones cuyos efectos no se pueden despreciar.

#### Arreglo trivial

De nuevo se presentan los patrones de reflectancia de ambas configuraciones.

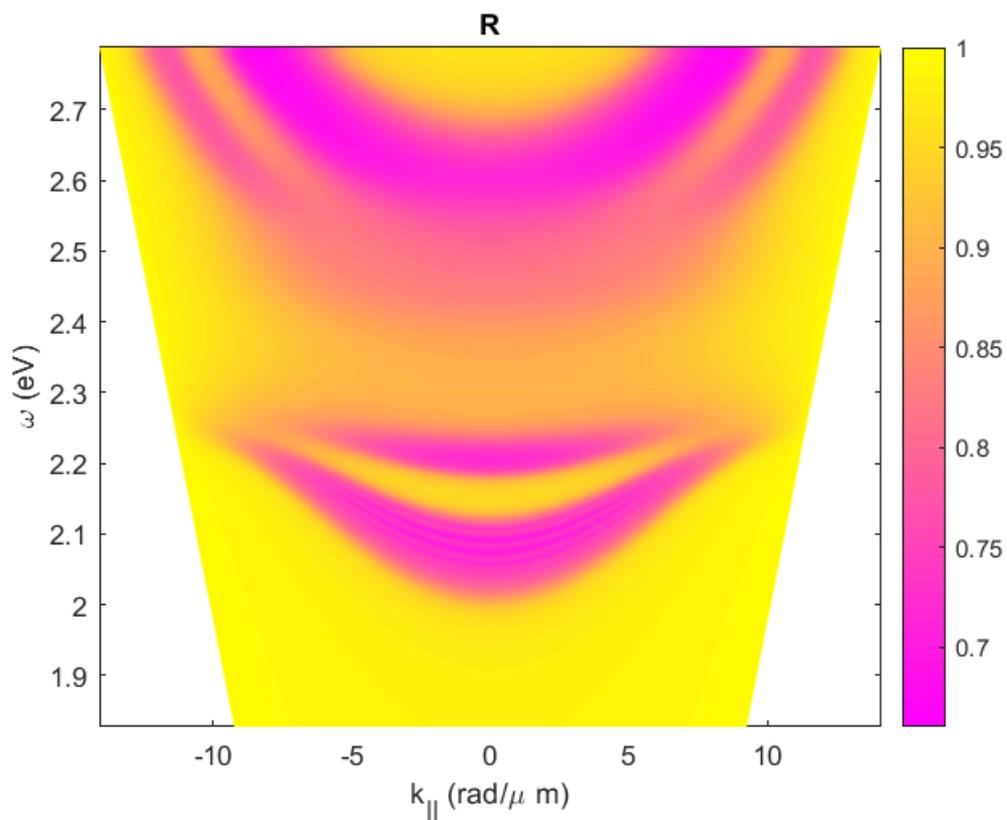


Figura 27: Patrón de reflectancia del arreglo trivial. Se ha graficado la reflectancia como función de  $k_{||}$  y la frecuencia angular de la radiación incidente ( $\omega\hbar$ ) empleando los índices de refracción de la plata y *Eritrosina B* [7, 8], los espesores de los espejos son  $30nm$  y  $40nm$  y el de la molécula orgánica  $140nm$ .

Se tienen un par de ramas para el *lower* y el *upper polariton* de tal forma que el resultado final son cuatro bandas formando dos brechas energéticas en el patrón de reflectancia, esta característica puede verse desde los cálculos de energías propias del modelo *SSH* en

el espacio recíproco (figuras 20 y 21) pues cada polaritón tiene asociadas dos bandas de energía.

Es interesante enfatizar lo siguiente: ya que cada cavidad contribuye con un par de ramas polaritónicas, mientras se vaya aumentando el número de celdas unitarias de la cadena, las bandas de mínima reflectancia irán transformándose en continuas. Con 20 cavidades es posible ver aún las ramas polaritónicas formando las cuatro bandas del patrón.

Nótese que el par de bandas del *lower polariton* se encuentran separadas por una distancia que se hace máxima en incidencia normal y se va cerrando mientras  $k_{\parallel}$  crece y de hecho esta separación entre bandas se encuentra en el mismo lugar que la banda del *lower polariton* de una sola cavidad, algo que se veía ya desde la gráfica de valores propios del hamiltoniano del modelo *SSH*, figura 18.

Esto mismo ocurre con las bandas que se encuentran por encima de la energía del excitón, la separación entre ellas está en el mismo sitio que la banda del *upper polariton* de una cavidad. Se dice entonces que las bandas polaritónicas del arreglo trivial se encuentran alrededor de la energía cero, es decir, la energía correspondiente a una sola cavidad.

Nuevamente, cuando la naturaleza fotónica impera en los polaritones entonces pueden ser visualizados mejor en el patrón de reflectancia, esto ocurre con las bandas que se encuentran en los extremos superior e inferior, al estar "lejos" de la energía del excitón tienden a estar mejor definidas que el otro par.

Una vez más se puede apreciar que la banda inferior del *upper polariton* se difumina debido al continuo de excitaciones del espectro de absorción de la *Eristrosina B*.

Arreglo topológico

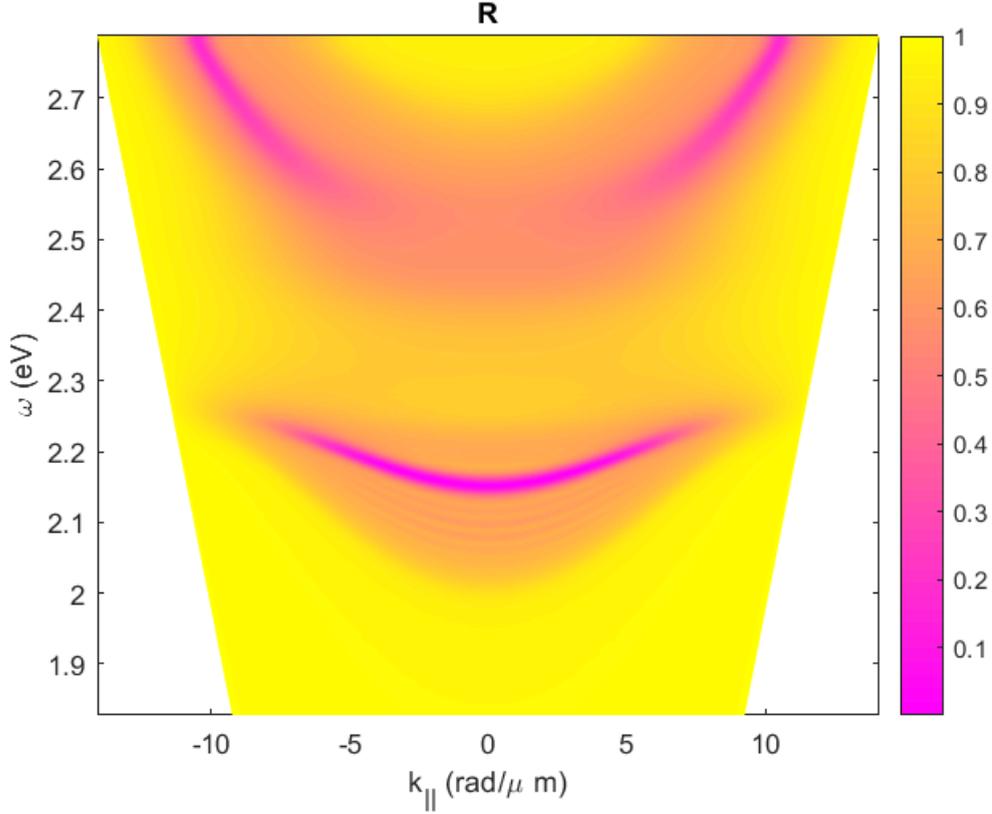


Figura 28: Patrón de reflectancia del arreglo topológico. Se ha graficado la reflectancia como función de  $k_{||}$  y la frecuencia angular de la radiación incidente ( $\omega\hbar$ ) empleando los índices de refracción de la plata y *Eritrosina B* [7, 8], los espesores de los espejos son  $30nm$  y  $40nm$  y el de la molécula orgánica  $140nm$ .

Lo primero que se observa en este patrón es su enorme similitud con la reflectancia de una sola cavidad, pues además de las 4 bandas polaritónicas que se tenían en el arreglo trivial aparecen dos ramas adicionales que se ubican justo en la energía cero.

Además de ello se aprecia que la banda de energía cero que está debajo de la energía del excitón esta mejor definida que la banda que está por encima, este efecto se debe nuevamente a la asimetría del espectro de absorción de la molécula orgánica.

La aparición de las dos bandas adicionales (las cuales ya habían sido predichas desde la figura 19 en forma de estados degenerados) son la consecuencia del efecto de borde en esta configuración al cambiar el orden de los espejos. Por otra parte esto también se puede explicar aclarar con la polarización del modelo *SSH* pues al estar en los estados de energía cero es posible tener una preferencia en los sitios del arreglo.

$$E_m = 0 \implies \langle \Psi_m | \hat{\Gamma} | \Psi_m \rangle \neq 0. \quad (11.1)$$

Y en efecto, debido a la aparición de estados con energía cero se tiene una polarización en favor de los sitios A ( $\langle \Psi_m | \hat{P}_A | \Psi_m \rangle > \langle \Psi_m | \hat{P}_B | \Psi_m \rangle$ ).

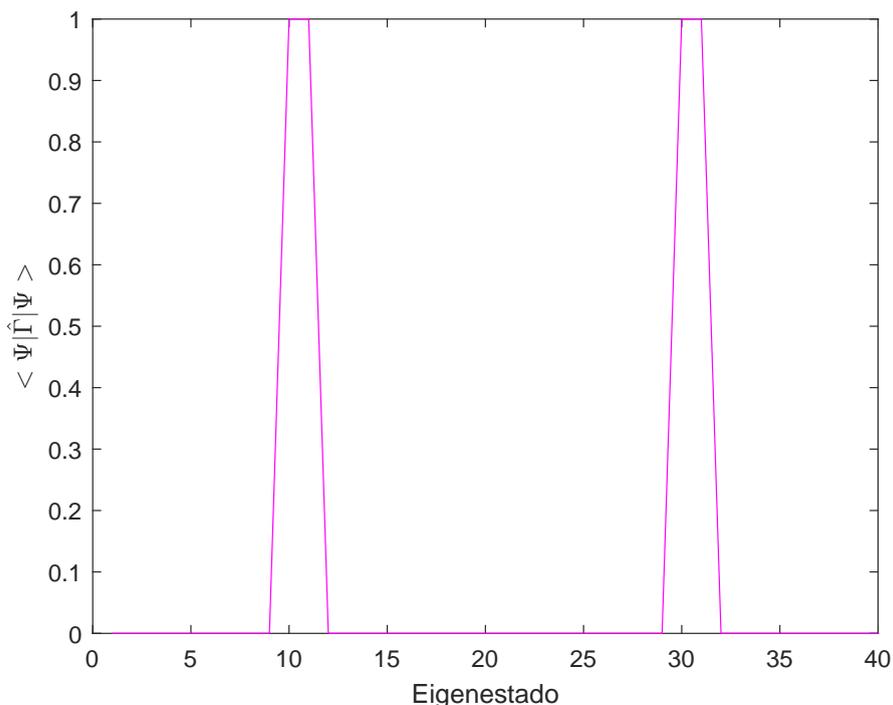


Figura 29: Valor esperado del operador quiral del arreglo topológico. Es posible notar que en los estados correspondientes a la energía cero hay una preferencia por los sitios A.

En la gráfica 29 (véase la nota al final de esta sección) puede verse que el valor esperado del operador quiral es distinto de cero sólo en los estados degenerados con energía cero.

Adicionalmente, se presenta la función de onda (calculada numéricamente, véase la nota al final de esta sección) correspondiente a uno de los estados con energía cero que aparecen en este arreglo:

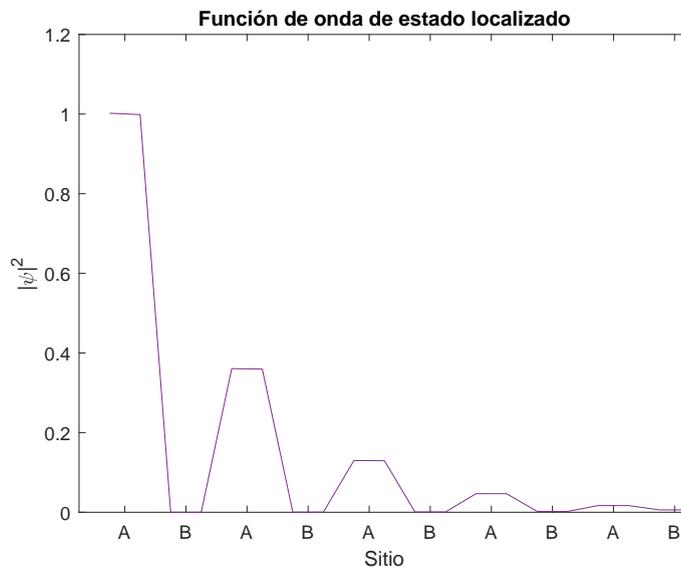


Figura 30: Función de onda de energía del estado localizado. Es posible ver una probabilidad distinta de cero en los sitios A y una probabilidad nula en los sitios B. Además la probabilidad decae exponencialmente al avanzar en celdas unitarias.

La función de onda tiene valores distintos de cero sólo en los sitios A, decae exponencialmente conforme se avanza en las celdas unitarias, entonces se tiene la "máxima probabilidad" de encontrar al polaritón al inicio del arreglo (en el primer sitio A), lo que provoca que la reflectancia se comporte como si sólo se tuviera una cavidad, de ahí la similitud entre los patrones de la cavidad singular y la configuración topológica.

Con el desarrollo de este proyecto es posible ver la necesidad de tener un acercamiento al sistema desde dos modelos distintos siendo la matriz de transferencia el más sencillo de ellos pero al mismo poseyendo una poderosa capacidad para describir las propiedades ópticas de los arreglos, todo desde una perspectiva clásica. Por otra parte se mostró que el modelo *SSH* proporciona una excelente explicación a las características mostradas por la matriz de transferencia, atribuyendo varias propiedades a la naturaleza fotónica o excitónica de los polaritones.

Es claro que la frontera entre la naturaleza clásica y cuántica no está del todo definida, sin embargo la parte importante es que ambos formalismos son complementarios, algunas propiedades que se escapan de un modelo quedan descritas por el otro, como por ejemplo los estados degenerados, en el patrón de reflectancia no es posible saber cuántos estados tienen energía cero ya que sólo se ve una banda, en contraste, en las energías propias del modelo *SSH* se puede ver que de hecho son dos estados degenerados.

Otros ejemplos podrían ser el porqué de la aparición de las 4 bandas polaritónicas o la semejanza entre el patrón de reflectancia de la cavidad singular y el de la configuración topológica, estos fenómenos son visibles con la matriz de transferencia pero la forma más completa de entenderlos es mediante el modelo de amarre fuerte entre fotones y excitones.

En resumen, la matriz de transferencia brinda información cualitativa y además ofrece un vínculo con los resultados experimentales, mientras que el modelo *SSH* explica los detalles de las gráficas desde la perspectiva de las componentes elementales del sistema.

Por otra parte, analizando la topología del modelo *SSH* se concluye que la configuración topológica tiene asociada un *winding number* no trivial, es decir, posee un invariante topológico. Una consecuencia de esto es que el sistema es resistente a perturbaciones o imperfecciones de fabricación lo cual puede ser explotado para numerosas aplicaciones tecnológicas [6, 12].

**Nota final:** Los patrones de reflectancia, las energías propias del modelo *SSH*, la función de onda y la polarización se han obtenido numéricamente en el software **MATLAB**, si se desea obtener los códigos favor de solicitarlos al correo: *jarosa99.san@gmail.com*

## Referencias

- [1] R.D. Mattuck. *A guide to Feynman diagrams in the many-body problem*. Dover Publications, 1992.
- [2] M. Combescot & S. Shiau. *Excitons and Cooper Pairs*. Oxford University Press, 2016.
- [3] V. M. Agranovich, M. Litinskaia, and D. G. Lidzey. Cavity polaritons in microcavities containing disordered organic semiconductors. *Phys. Rev. B*, 67:085311, 2003.
- [4] D.J. Griffiths. *Introduction to Electrodynamics*. Pearson, 2013.
- [5] P. Yeh. *Optical Waves in Layered Media*. Wiley-Interscience, 1988.
- [6] J. Andrés Rojas-Sánchez, Yesenia A. García Jomaso, Brenda Vargas, David Ley Domínguez, César L. Ordoñez Romero, Hugo A. Lara-García, Arturo Camacho-Guardian, and Giuseppe Pirruccio. Topological frenkel exciton polaritons in one-dimensional lattices of strongly coupled cavities. *Phys. Rev. B*, 107:125407, 2023.
- [7] Yesenia A. García Jomaso, Brenda Vargas, David Ley Dominguez, César L. Ordoñez Romero, Hugo A. Lara-García, Arturo Camacho-Guardian, and Giuseppe Pirruccio. Fate of the upper polariton: Breakdown of the quasiparticle picture in the continuum. *Phys. Rev. B*, 107:L081302, 2023.
- [8] E.D. Palik. *Handbook of Optical Constants of Solids*. Academic, New York, 1985.
- [9] A. Fetter & J. Dirk. *Quantum Theory of Many-Particle Systems*. McGraw-Hill, 1971.
- [10] K. Lagoudakis. *The Physics of Exciton-Polariton Condensates*. EPFL Press, 2013.
- [11] A. Pályi J. K. Asbóth, L. Oroszlány. *A Short Course on Topological Insulators*. Springer, 2015.
- [12] A. Amo. *Topological photonics in polariton lattices*. PhD thesis, Universidad de Lille, 2022.