

ANÁLISIS TEÓRICO DE OSCILACIONES CUÁNTICAS dHvA EN LOS TELUROS  
CUASI-1D TaTe<sub>4</sub> y NbTe<sub>4</sub>.

JOSE RAUL MARTINEZ AFANADOR

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE CIENCIAS  
ESCUELA DE FÍSICA  
BUCARAMANGA

2026

ANÁLISIS TEÓRICO DE OSCILACIONES CUÁNTICAS  $dHvA$  EN LOS TELUROS  
CUASI-1D  $TaTe_4$  y  $NbTe_4$ .

JOSE RAUL MARTINEZ AFANADOR

Trabajo de Grado para optar al título de FÍSICO

Director

ANDRÉS CAMILO GARCIA CASTRO

Ph.D.

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER

FACULTAD DE CIENCIAS

ESCUELA DE FÍSICA

BUCARAMANGA

2026

## **DEDICATORIA**

A mi familia, Teo, mis amigos y a mi.

## **AGRADECIMIENTOS**

Para mi familia, papá, mamá, hermano, cuñada y Teo. Por ser los cimientos de mi vida y por cada día brindarme su cariño, apoyo y compañía. Por ayudarme a abrir mi mente y darme herramientas para resolver problemas.

A Jose Raul de hace 10 años, 5 años, 1 año, 6 meses, 2 meses, 1 días y de hace un 1 segundo. Por toda tu dedicación y el cariño con el que haces tus cosas.

A mis amigos, mi pareja actual y el parche romántico previo. Por su cariño, apoyo y el tiempo de diversión que siempre me renovaban la energía.

A mi maestro el Profesor Andrés Camilo, le agradezco muchísimo confiarme parte de su trabajo y darme esta gran oportunidad. Así mismo por su guía y cuidado. Valoro un montón la inmensa cantidad de aprendizajes que este trabajo trajo consigo.

## CONTENIDO

	pág.
<b>INTRODUCCIÓN</b>	<b>12</b>
<b>1 MARCO TEÓRICO Y ESTADO DEL ARTE</b>	<b>14</b>
1.1 Compuestos TaTe <sub>4</sub> y NbTe <sub>4</sub>	14
1.2 Teoría Funcional de la densidad	18
1.2.1 Fundamentos y ecuaciones de Kohn–Sham	18
1.3 Acople espín-órbita	21
1.4 Definición superficie de Fermi	24
1.5 Oscilaciones Cuánticas	25
1.5.1 El movimiento de los electrones	26
1.5.2 Cuantización de las órbitas de los electrones.	27
1.5.3 Fórmula de Lifshitz-Kosevich.	30
1.5.4 Efecto De Haas-van Alphen	31
1.5.5 Observación experimental de oscilaciones cuánticas	31
1.6 Algoritmo computacional SKEAF	34
1.6.1 Relación entre la dependencia angular de la frecuencia dHvA y la geometría de los bolsillos	39
1.7 Teorema de Luttinger.	39
1.8 Ondas de Densidad de Carga (CDWs)	41
1.8.1 Concepto general	41
1.8.2 Modelo del gas de electrones unidimensional	42
<b>2 METODOLOGÍA Y DETALLES COMPUTACIONALES</b>	<b>45</b>

2.1	Cálculos DFT	45
2.2	Construcción de superficies de Fermi.	47
2.3	SKEAF y análisis angular dHvA	48
2.4	Método de aplicación del teorema de Luttinger	49
<b>3</b>	<b>RESULTADOS Y ANÁLISIS.</b>	<b>52</b>
3.1	Superficies de Fermi	52
3.2	Análisis angular de las frecuencias dHvA	54
3.3	Comparación con frecuencias experimentales reportadas en la literatura	60
3.4	Masas efectivas	60
3.5	Teorema de Luttinger	68
3.5.1	Balance electrón–hueco y tipo de conductor	68
<b>4</b>	<b>CONCLUSIONES</b>	<b>70</b>
	<b>BIBLIOGRAFÍA</b>	<b>72</b>

## LISTA DE FIGURAS

		pág.
Figura 1	Cristal sintetizado de NbTe <sub>4</sub> .	14
Figura 2	La estructura cristalina del TaTe <sub>4</sub>	16
Figura 3	La estructura cristalina del NbTe <sub>4</sub>	16
Figura 4	Esquema del ciclo autoconsistente de Kohn–Sham.	22
Figura 5	Proyección de la trayectoria helicoidal en el espacio real del electrón llamada $R'$ .	26
Figura 6	Área recíproca producida por la proyección de una trayectoria helicoidal	27
Figura 7	Tubos de Landau	29
Figura 8	Ejemplo experimental de oscilaciones Shubnikov–de Haas observadas en la resistividad longitudinal $\rho_{xx}$ como función del campo magnético $B$ para diferentes orientaciones angulares del campo aplicado. La figura ilustra cómo las oscilaciones cuánticas pueden detectarse en mediciones de magnetotransporte a bajas temperaturas y cómo su señal aparece superpuesta sobre la medición de magnetorresistencia del material.	33
Figura 9	superficie de Fermi del $UPt_3$	35
Figura 10	Supercelda utilizada en el algoritmo SKEAF	36
Figura 11	Superficie de Fermi del $SrPtAs$	37
Figura 12	Ejemplos ideales de la dependencia angular de la frecuencia dHvA para distintas geometrías de pockets de una superficie de Fermi	40
Figura 13	Superficie de Fermi para el gas de electrones libres unidimensional.	43
Figura 14	Superficies de Fermi de los compuestos NbTe <sub>4</sub> y TaTe <sub>4</sub>	55
Figura 15	Estructura de Bandas de los compuestos NbTe <sub>4</sub> y TaTe <sub>4</sub>	56

Figura 16	Frecuencias dHvA calculadas para TaTe <sub>4</sub> y NbTe <sub>4</sub> , con y sin el efecto SOC.	59
Figura 17	Mapas experimentales de oscilaciones Shubnikov–de Haas en TaTe <sub>4</sub> para la muestra S4, reportados por Rojas Castillo. Las figuras muestran la intensidad normalizada de la transformada rápida de Fourier (FFT) en función del ángulo de rotación del campo magnético y de la frecuencia de oscilación. El panel izquierdo corresponde a la rotación en el plano <i>a–a</i> , mientras que el panel derecho corresponde a la rotación en el plano <i>a–c</i> . En ambos casos se observan frecuencias altas asociadas principalmente al bolsillo $\beta$ , representado mediante las líneas azules. En el plano <i>a–a</i> también se identifica una contribución adicional de menor frecuencia asociada al bolsillo $\alpha$ , indicada por la línea verde.	61
Figura 18	Masas efectivas calculadas para TaTe <sub>4</sub> y NbTe <sub>4</sub> , con y sin el efecto SOC.	63
Figura 19	Órbitas extremales correspondientes a las menores masas efectivas de los pockets de la superficie de Fermi en TaTe <sub>4</sub> (SOC)	64
Figura 20	Órbitas extremales correspondientes a las menores masas efectivas de los pockets de la superficie de Fermi en TaTe <sub>4</sub> (sin SOC)	65
Figura 21	Órbitas extremales correspondientes a las menores masas efectivas de los pockets de la superficie de Fermi en NbTe <sub>4</sub> (SOC)	66
Figura 22	Órbitas extremales correspondientes a las menores masas efectivas de los pockets de la superficie de Fermi en NbTe <sub>4</sub> (sin SOC)	67

## LISTA DE TABLAS

	<b>pág.</b>	
Tabla 1	Parámetros de red para las estructuras tetragonales de TaTe <sub>4</sub> y NbTe <sub>4</sub> .	17
Tabla 2	Masas ciclotrón efectivas mínimas y máximas, y sus frecuencias dHvA asociadas para TaTe <sub>4</sub> (SOC)	64
Tabla 3	Masas ciclotrón efectivas mínimas y máximas, y sus frecuencias dHvA asociadas para TaTe <sub>4</sub> (sin SOC)	65
Tabla 4	Masas ciclotrón efectivas mínimas y máximas, y sus frecuencias dHvA asociadas para NbTe <sub>4</sub> (SOC)	66
Tabla 5	Masas ciclotrón efectivas mínimas y máximas, y sus frecuencias dHvA asociadas para NbTe <sub>4</sub> (sin SOC)	67
Tabla 6	Resultados del teorema de Luttinger para TaTe <sub>4</sub> y NbTe <sub>4</sub>	69

# RESUMEN

## RESUMEN

**TÍTULO:** ANÁLISIS TEÓRICO DE OSCILACIONES CUÁNTICAS dHvA EN LOS TELUROS CUASI-1D TaTe<sub>4</sub> y NbTe<sub>4</sub> \*

**AUTOR:** Jose Raul Martinez Afanador \*\*

**PALABRAS CLAVE:** Teoría funcional de la densidad (DFT); cuasiunidimensionalidad (Q1D); Ondas de densidad de carga CDW; oscilaciones cuánticas ;VASP; dHvA; TaTe<sub>4</sub>; NbTe<sub>4</sub>.

### DESCRIPCIÓN:

En este trabajo se presenta un análisis comparativo de la estructura electrónica de los compuestos cuasi-unidimensionales TaTe<sub>4</sub> y NbTe<sub>4</sub>, con el propósito de caracterizar su superficie de Fermi mediante la simulación de oscilaciones cuánticas de Haas-van Alphen (dHvA). La metodología se basó en cálculos *ab initio* dentro de la teoría funcional de la densidad (DFT), realizados sin y con acoplamiento espín-órbita (SOC), para evaluar el efecto de esta interacción sobre las propiedades electrónicas estudiadas. A partir de las bandas calculadas se construyeron las superficies de Fermi y se identificaron tres pockets principales para cada compuesto, denominados  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\delta$ . Posteriormente, mediante el código SKEAF, se obtuvieron las áreas extremales, las frecuencias dHvA y las masas efectivas asociadas a cada contribución. Finalmente, se estimaron las densidades de portadores mediante el teorema de Luttinger, comparando los casos con y sin SOC. Los resultados muestran comportamientos similares en la dependencia de las frecuencias dHvA con la orientación del campo magnético en ambos compuestos, mientras que el SOC introduce modificaciones finas en las áreas extremales y en las frecuencias calculadas.

---

\* Trabajo de grado

\*\* Facultad de Ciencias. Escuela de Física. Director: Andrés Camilo García Castro, Ph.D.

# ABSTRACT

## ABSTRACT

**TITLE:** THEORETICAL ANALYSIS OF dHvA QUANTUM OSCILLATIONS IN THE QUASI-1D TELLURIDES  $\text{TaTe}_4$  AND  $\text{NbTe}_4$  \*

**AUTHOR:** Jose Raul Martinez Afanador \*\*

**KEYWORDS:** Density functional theory (DFT); quasi-one-dimensionality (Q1D); charge-density waves (CDW); quantum oscillations; VASP; dHvA;  $\text{TaTe}_4$ ;  $\text{NbTe}_4$ .

### DESCRIPTION:

This work presents a comparative analysis of the electronic structure of the quasi-one-dimensional compounds  $\text{TaTe}_4$  and  $\text{NbTe}_4$ , aiming to characterize their Fermi surface through computational simulations of de Haas–van Alphen (dHvA) quantum oscillations. The methodology is based on *ab initio* calculations within density functional theory (DFT), performed without and with spin–orbit coupling (SOC), in order to evaluate the effect of this interaction on the electronic properties studied. From the calculated band structures, the Fermi surfaces were constructed and three main pockets were identified for each compound, labeled as  $\alpha$ ,  $\beta$ , and  $\delta$ . Subsequently, using the SKEAF code, the extremal areas, dHvA frequencies, and effective masses associated with each contribution were obtained. Finally, carrier densities were estimated using Luttinger’s theorem, comparing the cases with and without SOC. The results show similar behavior in the dependence of the dHvA frequencies on the orientation of the magnetic field in both compounds, while SOC introduces fine modifications in the extremal areas and in the calculated frequencies.

---

\* Undergraduate thesis

\*\* Faculty of Sciences. School of Physics. Advisor: Andrés Camilo García Castro, Ph.D.

# INTRODUCCIÓN

En los últimos años, los materiales cuasi-unidimensionales (cuasi-1D o Q1D) han despertado un renovado interés, motivado por su fuerte anisotropía estructural, la cual favorece la aparición de fenómenos electrónicos colectivos. Entre ellos se encuentran las ondas de densidad de carga (CDW, por sus siglas en inglés), las cuales pueden inducir anomalías en las propiedades de transporte; también se ha reportado superconductividad inducida bajo altas presiones y en algunos casos, un posible carácter topológico. En este trabajo se estudian los compuestos  $\text{TaTe}_4$  y  $\text{NbTe}_4$ , telururos de metales de transición con carácter cuasi-1D. La motivación principal para centrarse en estos materiales radica, por un lado, en que poseen una estructura cristalina relativamente simple frente a otros sistemas cuasi-1D y, por otro, en que exhiben una rica variedad de fases electrónicas, incluyendo diferentes estados CDW y superconductividad bajo presión. Por ello,  $\text{TaTe}_4$  y  $\text{NbTe}_4$  constituyen sistemas de referencia valiosos para comparar su estructura electrónica y sus propiedades de transporte con las de otros materiales cuasi-1D. En este contexto, un paso clave consiste en identificar con mayor claridad qué regiones de la estructura electrónica dominan el transporte y cuál es el papel de dicha estructura en el origen de las fases electrónicas mencionadas. Con este propósito, la presente tesis se enfoca en caracterizar la estructura electrónica en las proximidades del nivel de Fermi, puesto que los estados cercanos a  $E_F$  son los que pueden reorganizarse con menor costo energético y, en consecuencia, dominan la respuesta del sistema. Esta caracterización se aborda mediante el estudio de la superficie de Fermi (FS, por sus siglas en inglés).

El análisis de la FS permite identificar sus componentes conectadas, conocidas como pockets, que pueden presentarse como superficies cerradas o superficies abiertas dependiendo de su conectividad en el espacio recíproco. La caracterización geométrica de estos pockets aporta información relevante ya que su tamaño y su geometría permiten inferir el tipo de portador asociado (electrón o hueco), estimar la densidad de portadores y obtener magnitudes efectivas vinculadas a la dinámica de las cuasipartículas como la masa efectiva de estas. De manera complementaria, la forma

global de la FS ofrece un criterio para evaluar si el material exhibe un comportamiento cuasi-1D, cuasi-2D o cuasi-3D. Esta información resulta útil para discutir mecanismos que pueden estabilizar fases colectivas, por ejemplo, el anidamiento (nesting) de la superficie de Fermi, que se vuelve favorable cuando existen porciones aproximadamente paralelas de la FS, suele considerarse un ingrediente importante en el establecimiento de fases CDW.

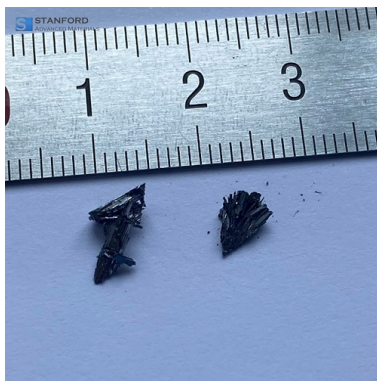
Para caracterizar los pockets y acceder a magnitudes directamente comparables con experimentos, se simula computacionalmente el efecto de Haas–van Alphen (dHvA), una herramienta de alta precisión y sensibilidad directa a la geometría de la FS a través de sus órbitas extremales. En este marco, esta tesis adopta un enfoque teórico–computacional: se calculan la estructura electrónica y la FS de  $\text{TaTe}_4$  y  $\text{NbTe}_4$  mediante teoría del funcional de la densidad (DFT) y teoría del funcional de la densidad dependiente del espín (SDFT) y a partir de estas superficies se obtienen las frecuencias dHvA (frecuencias de oscilación). Con ello, el objetivo del trabajo es aportar una caracterización de la FS, de los pockets y de las magnitudes asociadas a dHvA, de modo que sirvan como referencia para la interpretación y el contraste con mediciones experimentales futuras.

# 1. MARCO TEÓRICO Y ESTADO DEL ARTE

## 1.1. COMPUESTOS $\text{TaTe}_4$ Y $\text{NbTe}_4$

Los cristales de  $\text{TaTe}_4$  y  $\text{NbTe}_4$ , que son isoestructurales e isoelectrónicos, pertenecen a la familia de los calcogenuros de metales de transición. Cada uno de estos posee un grupo espacial  $P4/mcc$ , caracterizado por su simetría tetragonal. La estructura fue determinada mediante difracción de rayos X (XRD) y difracción de electrones en cristales de alta pureza. Durante su síntesis, los cristales se formaban como conjuntos de agujas paralelas, lo cual constituye una primera señal de sus propiedades cuasi-unidimensionales (quasi-1D). Además, estos compuestos presentan una apariencia brillante y metálica. En la figura 1 se muestra una imagen del  $\text{NbTe}_4$ <sup>1, 2</sup>.

Fig. 1. Cristal sintetizado de  $\text{NbTe}_4$ .



Fuente: tomado de<sup>3</sup>.

El atractivo de estos compuestos radica en su estructura cristalina, compuesta por cadenas de átomos con el metal de transición ubicado entre dos láminas planas. En cada lámina se encuen-

<sup>1</sup> K. Selte et al. "On the crystal structure of  $\text{NbTe}_4$ ". En: *Acta Chem. Scand.* 18 (1964), págs. 690-696. DOI: 10.3891/acta.chem.scand.18-0690

<sup>2</sup> FW Boswell, A Prodan y JK Brandon. "Charge-density waves in the quasi-one-dimensional compounds  $\text{NbTe}_4$  and  $\text{TaTe}_4$ ". En: *Journal of Physics C: Solid State Physics* 16.6 (1983), pág. 1067

<sup>3</sup> Stanford Advanced Materials. *NbTe4 crystal*. Accessed: 2025-04-03. n.d.

tran cuartetos de átomos de calcógeno dispuestos en forma de cuadrado. Al conectar dos láminas de calcógenos adyacentes, los átomos forman un antiprisma. La figura 2 muestra la estructura cristalina de  $\text{TaTe}_4$ , donde los antiprismas, dibujados en azul, son claramente visibles. Por otro lado la figura 3 expone el cristal de  $\text{NbTe}_4$ . La estructura en forma de encadenada compartida por los compuestos, induce una anisotropía estructural pronunciada, la cual influye significativamente en propiedades como la dispersión de fónones, la forma de la superficie de Fermi y la estructura electrónica de bandas <sup>2,4</sup>.

Estos efectos presentan una notable similitud con los predichos por el modelo de gas de electrones libres en un cristal unidimensional, especialmente en lo que respecta a la forma de la superficie de Fermi. Lo que justifica clasificar estos materiales como sistemas cuasi-unidimensionales.

Un aspecto estructural crucial de estos compuestos es que las cadenas atómicas están unidas mediante enlaces covalentes. En particular, el telurio desempeña un papel central en esta arquitectura. Los enlaces Te–Te exhiben un carácter covalente más marcado que el observado en otros calcógenos como el selenio o el azufre. Como consecuencia, las estequiometrías del telurio difieren de las de sus homólogos, además de que su radio de enlace es significativamente mayor <sup>7</sup>. Por lo tanto, esta configuración electrónica y estructural únicamente puede lograrse mediante el uso de átomos de telurio.

En la estructura del  $\text{NbTe}_4$ , la distancia de enlace entre átomos de telurio dentro de un cuadrado es de 3,29Å, mientras que la separación entre los átomos de Nb y Te es de 2,91Å. Además, la distancia entre los átomos de telurio de cuadrados adyacentes es de 3,87Å. De forma análoga, en

---

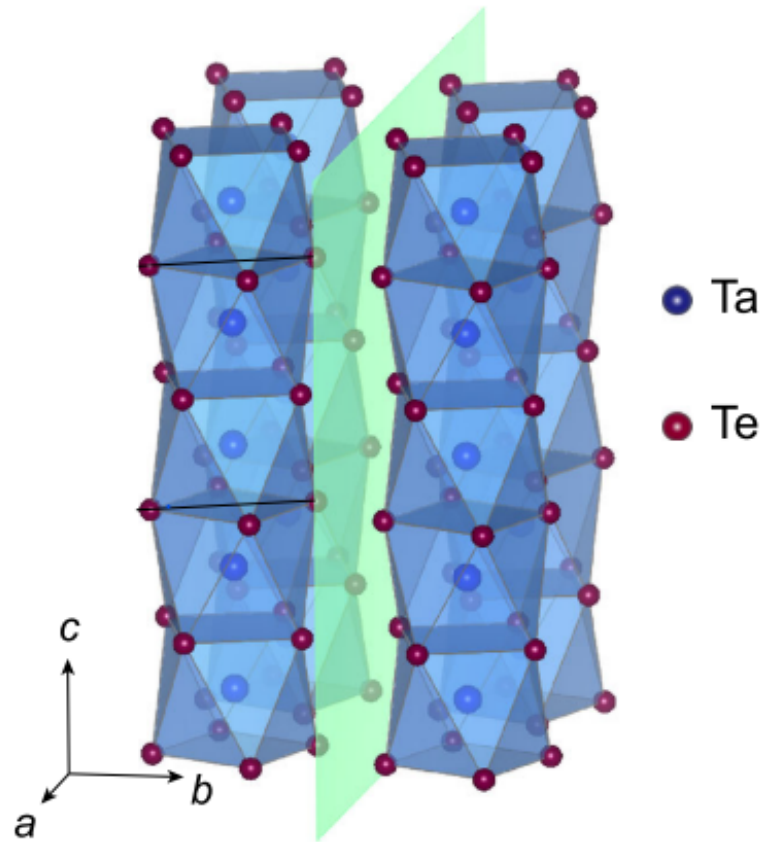
<sup>4</sup> Xi Zhang et al. “Eightfold fermionic excitation in a charge density wave compound”. En: *Physical Review B* 102 (3 jul. de 2020). DOI: 10.1103/PhysRevB.102.035125

<sup>5</sup> R. Z. Xu et al. “Orbital-selective charge-density wave in  $\text{TaTe}_4$ ”. En: *npj Quantum Materials* 8 (1 dic. de 2023). DOI: 10.1038/s41535-023-00573-8

<sup>6</sup> **yang2018pressure**

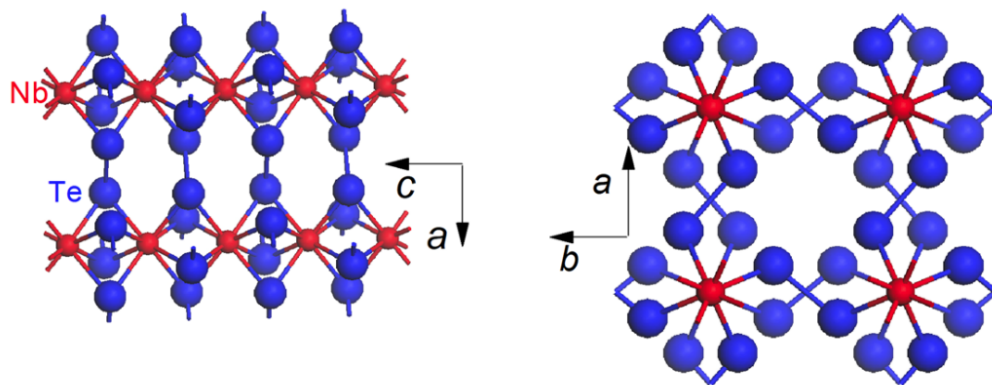
<sup>7</sup> Arthur Mar, Stephane Jobic y James A Ibers. “Metal-metal vs tellurium-tellurium bonding in  $\text{WTe}_2$  and its ternary variants  $\text{TaIrTe}_4$  and  $\text{NbIrTe}_4$ ”. En: *Journal of the American Chemical Society* 114.23 (1992), págs. 8963-8971

Fig. 2. La estructura cristalina del TaTe<sub>4</sub>



Fuente: adaptado de <sup>5</sup>.

Fig. 3. La estructura cristalina del NbTe<sub>4</sub>



Fuente: adaptado de <sup>6</sup>.

el TaTe<sub>4</sub>, la distancia de enlace entre los átomos de telurio en un cuadrado es de 3,29Å, mientras que la separación entre los átomos de Ta y Te es de 2,89Å. Al igual que en el caso anterior, la distancia entre los átomos de telurio en cuadrados adyacentes es de 3,87Å.

Con el fin de complementar la descripción de la estructura cristalina, a continuación se presentan los parámetros de red de los cristales tetragonales TaTe<sub>4</sub> y NbTe<sub>4</sub>.

Tabla 1. Parámetros de red para las estructuras tetragonales de TaTe<sub>4</sub> y NbTe<sub>4</sub>.

Compuesto	<i>a</i> (Å)	<i>b</i> (Å)	<i>c</i> (Å)
TaTe <sub>4</sub>	6.5069	6.5069	6.7845
NbTe <sub>4</sub>	6.4984	6.4984	6.7725

Fuente: elaboración propia a partir de los parámetros estructurales utilizados en los cálculos DFT.

La particular configuración estructural de TaTe<sub>4</sub> y NbTe<sub>4</sub>, marcada por su carácter cuasi-unidimensional y por la presencia de enlaces Te–Te fuertemente covalentes, afecta directamente la aparición de fenómenos electrónicos colectivos. En este contexto, ambos compuestos exhiben estados de onda de densidad de carga (CDW) a temperaturas por debajo de la ambiente, un comportamiento típico de materiales con estructuras anisotrópicas. Además, se ha reportado que bajo la aplicación de presión, tanto TaTe<sub>4</sub> como NbTe<sub>4</sub> desarrollan estados superconductores, lo que sugiere una competencia o coexistencia entre fases ordenadas de distinta naturaleza <sup>2,8</sup>.

En particular, se ha propuesto que el TaTe<sub>4</sub> exhibe propiedades topológicas, evidenciadas por la presencia de puntos de Dirac en su estructura electrónica de bandas. Estos puntos se mantienen tanto en el estado CDW como en ausencia de dicha modulación. Asimismo, en el TaTe<sub>4</sub> se ha reportado una magnetorresistencia (MR) positiva elevada, así como una transición metal-semiconductor inducida por campo magnético a bajas temperaturas, específicamente cuando dicho campo se aplica perpendicularmente al eje cristalográfico *c* <sup>4,9</sup>.

<sup>8</sup> Yifang Yuan et al. "Pressure-Induced Superconductivity in Topological Semimetal Candidate TaTe<sub>4</sub>". En: *Advanced Electronic Materials* 6 (3 mar. de 2020). DOI: 10.1002/aelm.201901260

<sup>9</sup> Yuxia Gao et al. "Anisotropic large magnetoresistance in TaTe<sub>4</sub> single crystals". En: *Journal of Applied Physics* 122 (13 oct. de 2017). DOI: 10.1063/1.5005907

## 1.2. TEORÍA FUNCIONAL DE LA DENSIDAD

La teoría del funcional de la densidad (DFT, por sus siglas en inglés) es un método de primeros principios de la mecánica cuántica que permite estudiar las propiedades del estado fundamental de sistemas de muchos cuerpos a partir de la densidad electrónica. Debido a su buen equilibrio entre precisión y costo computacional, DFT se ha consolidado como una de las herramientas más utilizadas en física del estado sólido, química computacional y ciencia de materiales para el estudio de moléculas, sólidos, superficies e interfaces <sup>10</sup>.

Si bien DFT se formula como un método de primeros principios, es decir, basado en leyes fundamentales de la mecánica cuántica y no en un ajuste directo a resultados experimentales, su aplicación práctica requiere aproximaciones para el funcional de intercambio y correlación el cual posee la información de la interacción de los electrones <sup>11</sup>. Su eficiencia para describir sistemas complejos a escala atómica se basa en dos pilares teóricos: los teoremas de Hohenberg–Kohn y las ecuaciones de Kohn–Sham.

**1.2.1. Fundamentos y ecuaciones de Kohn–Sham** El propósito de esta sección es explicar cómo la teoría del funcional de la densidad (DFT) logra reproducir la función de onda de muchos cuerpos que describe el comportamiento cuántico de los electrones en un sistema. El punto de partida consiste en reconocer que la energía total de un sistema electrónico puede expresarse como un funcional de la función de onda de muchos cuerpos.

$$E = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \Psi^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \hat{H} \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (1)$$

donde  $\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$  representa la función de onda del sistema de  $N$  electrones. En la aproximación

---

<sup>10</sup> Feliciano Giustino. *Materials modelling using density functional theory: properties and predictions*. Oxford University Press, 2014

<sup>11</sup> Manoj Kumar Banjare y Dinesh Tandon. "Explicit modeling of corrosion inhibition". En: *Computational Modelling and Simulations for Designing of Corrosion Inhibitors*. Elsevier, 2023, págs. 227-240

de Born–Oppenheimer, los núcleos se consideran fijos en posiciones conocidas, de modo que el Hamiltoniano electrónico adopta la forma

$$\hat{H}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = - \sum_i \frac{1}{2} \nabla_i^2 + \sum_i V_n(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}. \quad (2)$$

Por tanto, la energía total depende funcionalmente de la función de onda, es decir,

$$E = F[\Psi]. \quad (3)$$

El teorema de Hohenberg–Kohn constituye la idea central de DFT. Este establece que toda la información del sistema electrónico en el estado fundamental está contenida en la densidad electrónica  $n(\mathbf{r})$ , y no en la función de onda de muchos cuerpos. Sus principios fundamentales se resumen en los siguientes puntos:

- En el estado base del sistema, la densidad electrónica determina de manera única el potencial externo de los núcleos.
- En cualquier estado cuántico, el potencial externo de los núcleos determina de manera única la función de onda de muchos electrones.
- En cualquier estado cuántico, la energía total es un funcional de la función de onda de muchos cuerpos (ver ecuación 1).

En consecuencia, en el estado base, la densidad  $n(\mathbf{r})$  determina de manera única la energía total del sistema.

$$E_0 \rightarrow F[n] \quad (4)$$

donde  $E_0$  representa la energía total del estado fundamental del sistema.

Aun cuando los teoremas de Hohenberg–Kohn establecen que la energía del estado fundamental puede escribirse como un funcional de la densidad  $n(\mathbf{r})$ , no indican cómo obtener una expresión explícita para ese funcional. Esta dificultad es precisamente la que aborda la propuesta de

Kohn y Sham (1965). En lugar de tratar directamente el sistema real de electrones interactuantes, ellos introducen un sistema auxiliar no interactuante, construido para que reproduzca la misma densidad electrónica del sistema original. El beneficio de esta elección es que el problema se reduce a resolver ecuaciones efectivas de una sola partícula, mientras que los efectos de la interacción electrón–electrón se concentran en un único término correctivo, el funcional de intercambio y correlación. Con esta idea, la energía total puede organizarse como la suma de contribuciones conocidas más  $E_{xc}[n]$ .

El funcional de energía total propuesto por Kohn y Sham combina los distintos aportes energéticos del sistema y se expresa como

$$E[n] = \int d\mathbf{r} n(\mathbf{r})V_n(\mathbf{r}) - \sum_i \int d\mathbf{r} \phi_i^*(\mathbf{r}) \frac{\nabla^2}{2} \phi_i(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + E_{xc}[n]. \quad (5)$$

En esta formulación, el término  $E_{xc}[n]$  representa la energía de intercambio y correlación, que agrupa todos los efectos cuánticos derivados de la interacción entre electrones. Aunque su forma exacta es desconocida, constituye el componente clave de la DFT y debe ser aproximado mediante funcionales empíricos <sup>12</sup>.

Con el funcional de energía total  $E[n]$  ya especificado, el siguiente paso es establecer el criterio mediante el cual se determina la densidad electrónica del estado fundamental  $n_0(\mathbf{r})$ . Este criterio es el principio variacional de Hohenberg–Kohn que afirma que la densidad  $n_0(\mathbf{r})$  es aquella que minimiza el funcional de energía total.

$$\left. \frac{\delta F[n]}{\delta n} \right|_{n_0} = 0. \quad (6)$$

Este principio garantiza que la densidad obtenida del sistema de Kohn–Sham corresponde al estado fundamental del sistema físico real.

---

<sup>12</sup> Pierre Hohenberg y Walter Kohn. “Inhomogeneous electron gas”. En: *Physical review* 136.3B (1964), B864

A partir de esta formulación, se obtienen las ecuaciones de Kohn–Sham, que describen el funcionamiento del sistema ficticio propuesto por Kohn y Sham para reproducir el comportamiento del sistema real. Dichas ecuaciones se escriben como,

$$\left[ -\frac{1}{2}\nabla^2 + V_n(\mathbf{r}) + V_H(\mathbf{r}) + V_{xc}(\mathbf{r}) \right] \phi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \phi_i(\mathbf{r}), \quad (7)$$

donde  $V_n(\mathbf{r})$  representa el potencial externo debido a los núcleos,  $V_H(\mathbf{r})$  es el potencial de Hartree asociado a la interacción coulombiana clásica, y  $V_{xc}(\mathbf{r})$  es el potencial de intercambio y correlación.

A partir de las soluciones  $\phi_i(\mathbf{r})$ , la densidad electrónica total del sistema se determina como

$$n(\mathbf{r}) = \sum_i |\phi_i(\mathbf{r})|^2. \quad (8)$$

Estas ecuaciones se resuelven de manera autoconsistente, ya que tanto los potenciales como la densidad dependen mutuamente: se inicia con una densidad tentativa, se calculan los potenciales efectivos, se resuelven las ecuaciones para obtener nuevas funciones  $\phi_i(\mathbf{r})$ , se actualiza la densidad y el proceso se repite hasta lograr la convergencia del sistema.

Este procedimiento iterativo se conoce como ciclo autoconsistente de Kohn–Sham y se ilustra en la figura 4, donde se esquematizan los pasos fundamentales: la estimación inicial de la densidad, el cálculo del potencial efectivo, la resolución de las ecuaciones de Kohn–Sham, la evaluación de la nueva densidad electrónica y la comprobación de la convergencia hasta alcanzar la densidad del estado base <sup>13,10</sup>.

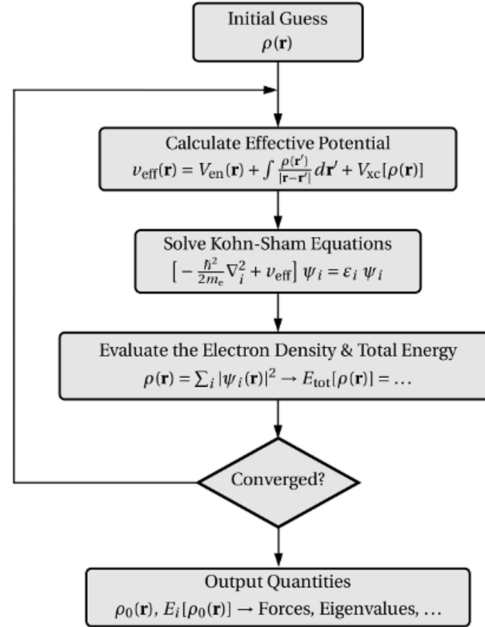
### 1.3. ACOUPLE ESPÍN-ÓRBITA

Para introducir el acoplamiento espín–órbita es necesario revisar, en primer lugar, los fundamentos físicos asociados al espín del electrón y a su interacción con campos magnéticos, tal como

---

<sup>13</sup> Walter Kohn y Lu Jeu Sham. “Self-consistent equations including exchange and correlation effects”. En: *Physical review* 140.4A (1965), A1133

Fig. 4. Esquema del ciclo autoconsistente de Kohn–Sham. El proceso comienza con una densidad inicial  $\rho(\mathbf{r})$  y se repite hasta que la densidad y la energía total convergen hacia los valores del estado base.



Fuente: adaptado de <sup>10</sup>.

emerge en la formulación relativista de la mecánica cuántica. La ecuación de Dirac, al describir al electrón mediante una nueva entidad matemática llamada espinor, fuerza la introducción de un grado de libertad intrínseco adicional: el espín. El espín del electrón interactúa con campos magnéticos, y esta interacción puede describirse teóricamente mediante la formulación del momento angular de espín y del momento magnético asociado.

En el límite no relativista, la ecuación de Dirac se reduce a la ecuación de Pauli, en la cual aparece de manera explícita el término de interacción entre el espín del electrón y un campo magnético externo, ubicado al lado derecho de la ecuación:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[ \frac{(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2}{2m} + e\phi - \frac{e\hbar}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \right] \psi, \quad (9)$$

A partir de este término se identifica el momento magnético del espín:

$$\boldsymbol{\mu}_s = -\frac{e\hbar}{2m} \boldsymbol{\sigma} = -\frac{e}{m} \mathbf{S}, \quad (10)$$

donde se ha utilizado la definición del operador de espín  $\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$ . Esta formulación, expresada directamente en términos del operador de espín, proporciona la base teórica y física sobre la cual se construye la descripción del acoplamiento espín-órbita, pues establece con claridad cómo el espín interactúa con campos magnéticos y cuál es la estructura matemática que gobierna dicha interacción.

Con estos elementos, consideremos el sistema conformado por un electrón moviéndose alrededor de un núcleo. En el marco inercial del núcleo, el electrón describe una trayectoria orbital determinada por el potencial electrostático central. Sin embargo, al analizar el sistema desde el marco inercial del electrón, es el núcleo el que parece desplazarse describiendo una órbita alrededor del electrón. Debido a que el núcleo posee carga positiva, en este marco es equivalente a una corriente eléctrica, lo que implica la generación de un campo magnético efectivo en la posición del electrón. Este movimiento relativo entre el núcleo y el electrón constituye el origen físico del acoplamiento espín-órbita.

En una aproximación no relativista, dicho campo magnético efectivo puede obtenerse a partir de la transformación relativista de los campos hacia un marco en movimiento:

$$\mathbf{B}_{\text{eff}} = \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{v}}{c^2}, \quad (11)$$

donde  $\mathbf{E} = -\frac{dV}{dr} \frac{\mathbf{r}}{r}$  es el campo eléctrico radial generado por el núcleo. Utilizando la identidad  $\mathbf{L} = m \mathbf{r} \times \mathbf{v}$ , se obtiene:

$$\mathbf{B}_{\text{eff}} = -\frac{1}{mc^2 r} \frac{dV}{dr} \mathbf{L}. \quad (12)$$

Al introducir este campo efectivo en el término de interacción magnética del espín,

$$H_{\text{int}} = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B}_{\text{eff}}, \quad (13)$$

se deriva el Hamiltoniano del acoplamiento espín-órbita en su forma estándar:

$$H_{so} = -\frac{e}{m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}.^{14} \quad (14)$$

#### 1.4. DEFINICIÓN SUPERFICIE DE FERMI

La superficie de Fermi es el objeto matemático central de este trabajo, ya que a partir de su simulación con VASP se busca reproducir las frecuencias del efecto de Haas–van Alphen (dHvA) mediante la ecuación (7) y el algoritmo implementado en el código SKEAF<sup>15</sup>. En esta sección se presenta el marco teórico necesario para definir con precisión la superficie de Fermi, partiendo del comportamiento cuántico de los electrones en sólidos.

En un sólido cristalino, una banda electrónica es el conjunto continuo de niveles de energía permitidos que pueden ocupar los electrones. Estas bandas surgen de la combinación de los orbitales atómicos bajo la acción de un potencial periódico  $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R}_i)$ , donde  $\mathbf{R}_i$  son los vectores de red del cristal. Esta periodicidad permite aplicar el teorema de Bloch e introducir de manera natural el espacio recíproco. En materiales reales, el potencial efectivo incluye las interacciones de Coulomb entre electrones y puede verse modificado por campos externos y por el acoplamiento espín-órbita (SOC), lo que se refleja en la estructura de bandas.

Para definir la superficie de Fermi es necesario introducir el concepto de ocupación electrónica. Los electrones son fermiones indistinguibles y, por tanto, obedecen el principio de exclusión de Pauli, que establece que dos electrones no pueden ocupar simultáneamente el mismo estado cuántico. En equilibrio y a temperatura cero, el sistema adopta su estado de mínima energía total; como consecuencia, los estados de menor energía se ocupan primero y se van llenando sucesivamente hasta cierto nivel máximo. Considerando el espín, cada estado  $(n, \mathbf{k})$  —donde  $n$  es el

---

<sup>14</sup> Stephen Blundell. *Magnetism in condensed matter*. OUP Oxford, 2001

<sup>15</sup> P. M.C. Rourke y S. R. Julian. “Numerical extraction of de Haas-van Alphen frequencies from calculated band energies”. En: *Computer Physics Communications* 183 (2 feb. de 2012), págs. 324-332. DOI: 10.1016/j.cpc.2011.10.015

índice de banda y  $\mathbf{k}$  el vector de onda cristalino en el espacio recíproco— puede albergar, como mucho, dos electrones, uno con espín up y otro con espín down.

El nivel de Fermi se define como el último nivel de energía ocupado por los electrones a temperatura cero absoluto ( $T = 0\text{ K}$ ). La energía de Fermi  $E_F$  es, por tanto, el valor de la energía asociado a ese último nivel ocupado. Esta energía marca la frontera entre los estados electrónicos ocupados y los que permanecen vacíos. La superficie de Fermi (FS) es, entonces, el conjunto de puntos  $\mathbf{k}$  en el espacio recíproco que satisfacen  $\varepsilon_n(\mathbf{k}) = E_F$ ; es decir, los puntos en los que la energía de una banda electrónica coincide con la energía de Fermi.

Al graficar todos los puntos  $\mathbf{k}$  de las distintas bandas electrónicas que satisfacen  $\varepsilon_n(\mathbf{k}) = E_F$  se obtiene la superficie de Fermi: un conjunto de una o varias hojas continuas en el espacio recíproco, como se ilustra en la figura ???. La geometría de estas hojas codifica la naturaleza de los portadores y, por tanto, muchas de sus propiedades electrónicas, entre ellas el transporte, la aparición de ondas de densidad de carga y las oscilaciones cuánticas de Haas–van Alphen.

En este trabajo, los electrones se describen mediante la teoría del funcional de la densidad (DFT), utilizando el Hamiltoniano de Kohn–Sham. La solución autoconsistente de este problema proporciona las energías  $\varepsilon_n(\mathbf{k})$  de los estados electrónicos, a partir de las cuales se obtienen las bandas electrónicas y, posteriormente, la superficie de Fermi de cada compuesto.

## 1.5. OSCILACIONES CUÁNTICAS

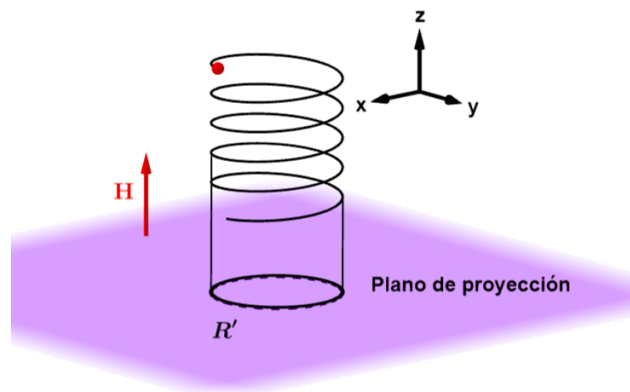
Se denomina oscilaciones cuánticas al comportamiento oscilatorio que presentan ciertos metales cuando se encuentran a muy bajas temperaturas y se someten a un campo magnético externo homogéneo, variable y de gran intensidad. En el marco de la aproximación semiclásica de electrones libres en un metal, el origen físico de estas oscilaciones cuánticas se asocia al movimiento helicoidal de los electrones libres, inducido por la fuerza de Lorentz generada por el campo magnético aplicado. Como consecuencia, la estructura electrónica del metal se ve modificada, ya que las bandas electrónicas se reorganizan en niveles discretos de energía llamados niveles de Landau.

**1.5.1. El movimiento de los electrones** Todo el formalismo teórico expuesto a continuación fue obtenido del libro de David Shoenberg sobre oscilaciones cuánticas <sup>16</sup>. En metales monovalentes o polivalentes, los electrones de valencia pueden aproximarse como electrones libres. Al aplicar un campo magnético homogéneo, estos describen un movimiento helicoidal dentro del metal, el cual está gobernado por la ecuación.

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = \frac{-e}{c} (\mathbf{v} \times \mathbf{H}). \quad (15)$$

En esta expresión, la velocidad del electrón se determina a partir de la estructura de bandas, mediante la relación  $\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon$ . Este movimiento en el espacio real impone una restricción sobre el espacio recíproco. Los electrones solo pueden ocupar estados pertenecientes a los puntos  $\mathbf{k}$  que pertenecen al conjunto de puntos cuya unión tiene la misma forma geométrica que la proyección de la órbita real sobre un plano perpendicular al campo magnético  $\mathbf{H}$  (véase la figura 5).

Fig. 5. Proyección de la trayectoria helicoidal en el espacio real del electrón llamada  $R'$ .

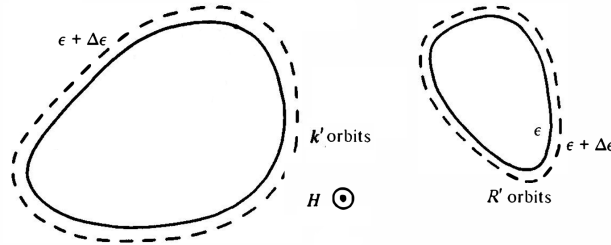


Fuente: elaboración propia.

<sup>16</sup> "The Fermi surfaces of copper, silver and gold. I. The de Haas-Van alphen effect". En: *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences* 255 (1052 nov. de 1962), págs. 85-133. DOI: 10.1098/rsta.1962.0011

Adicionalmente, la trayectoria en el espacio recíproco está escalada por un factor  $\eta = \frac{c\hbar}{eH}$  y rotada 90° respecto a la proyección de la trayectoria real. Como se ilustra en la figura 6.

Fig. 6. Área recíproca (figura izquierda) producida por la proyección de una trayectoria helicoidal general en el espacio real.



Fuente: adaptado de <sup>16</sup>.

**1.5.2. Cuantización de las órbitas de los electrones.** A partir de la regla de cuantización de Bohr–Sommerfeld <sup>17</sup>,

$$\oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{q} = (r + \gamma)2\pi\hbar \quad (16)$$

donde  $\mathbf{p}$  y  $\mathbf{q}$  representan el momento y la posición canónicos conjugados, respectivamente,  $r$  es un número entero, la integral se realiza sobre un ciclo cerrado, y  $\gamma$  es una constante de fase que depende de la forma de la superficie de energía  $\epsilon$  y de la magnitud del campo magnético  $\mathbf{H}$ . Para un electrón libre en un campo magnético, los significados de  $\mathbf{p}$  y  $\mathbf{q}$  son, respectivamente,

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} - \frac{e\mathbf{A}}{c}, \quad \mathbf{q} = \mathbf{R}'. \quad (17)$$

donde  $\mathbf{R}'$  es la proyección del movimiento ciclotrónico del electrón en el espacio real sobre un plano perpendicular al campo  $\mathbf{H}$ .

<sup>16</sup> Shoenberg, D. (1962). *The Fermi surfaces of copper, silver and gold. I. The de Haas–Van Alphen effect. Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 255(1052), 85–133. <https://doi.org/10.1098/rsta.1962.0011>

<sup>17</sup> D.J. Griffiths. *Introduction to Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, 2017

Al aplicar las expresiones específicas del momento y la posición proyectada en la condición de cuantización de Bohr–Sommerfeld, se obtiene que el flujo del campo magnético a través de la trayectoria cerrada descrita por  $\mathbf{R}'$  es una cantidad cuantizada:

$$\Phi = H\alpha = (r + \gamma) \frac{2\pi\hbar}{e}, \quad (18)$$

donde  $\alpha$  representa el área encerrada por dicha trayectoria en el plano perpendicular a  $\mathbf{H}$ . Esto implica que la trayectoria del electrón en el espacio real está restringida a valores de  $\alpha$  que mantengan la cuantización del flujo magnético, bajo la condición de que  $\mathbf{H}$  sea constante.

Aplicando la relación entre trayectorias reales y recíprocas dada por la ecuación 15, es posible redefinir la regla de cuantización en términos del área  $a$  encerrada por una trayectoria cerrada en el espacio recíproco, de la siguiente forma.

$$\alpha = \eta^2 a, \quad (19)$$

$$a(\varepsilon, \mathbf{k}) = (r + \gamma) \frac{2\pi e H}{c\hbar}. \quad (20)$$

La ecuación 20, conocida como la relación de Onsager, determina implícitamente los nuevos niveles de energía del sistema, denominados tubos de Landau, ver figura 7. Esta relación impone que solo los estados  $\mathbf{k}$  contenidos en las fronteras del área transversal  $a(\varepsilon, \mathbf{k})$  pueden ser ocupados. La magnitud del área  $a$  depende de valores específicos del campo magnético  $H$  y del índice cuántico entero  $r$ .

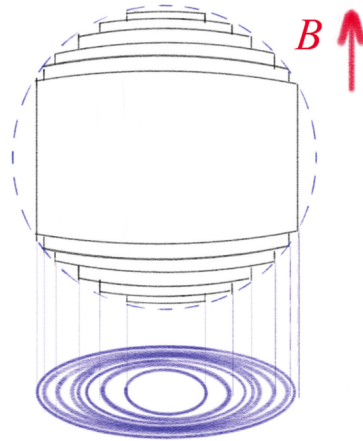
Para continuar con el análisis en el espacio recíproco, es necesario introducir una convención de coordenadas que facilite la formulación posterior. Un punto en el espacio  $\mathbf{k}$  se describe mediante las coordenadas  $\mathbf{k}$ ,  $k'_x$  y  $k'_y$ ; donde  $\mathbf{k}$  corresponde al eje paralelo a la dirección del campo magné-

---

<sup>18</sup> Weiyao Zhao y Xiaolin Wang. "Berry phase in quantum oscillations of topological materials". En: *Advances in Physics: X* 7.1 (2022), pág. 2064230

<sup>18</sup> Zhao, W., & Wang, X. (2022). *Berry phase in quantum oscillations of topological materials*. *Advances in Physics: X*, 7(1), 2064230.

Fig. 7. Vista gráfica de los tubos de Landau, cuantizados mediante la relación de Onsager (ecuación 20) en un sistema de gas de electrones libres. La esfera trazada con líneas punteadas representa la superficie de Fermi, lo que ilustra cómo el campo magnético aplicado fuerza que los niveles permitidos de los electrones sean aquellos dentro de las superficies de los tubos de Landau.



Fuente: adaptado de <sup>18</sup>.

tico  $\mathbf{H}$ , mientras que  $k'_x$  y  $k'_y$  definen el plano perpendicular a dicho campo.

La forma geométrica que adoptan las secciones transversales del espacio recíproco, es decir, las áreas  $a(\varepsilon, \mathbf{k})$  que aparecen en la regla de cuantización, puede explicarse considerando lo siguiente: dado que cada valor de  $\mathbf{k}$  define un plano perpendicular a  $\mathbf{H}$ , la forma de  $a$  está determinada por la geometría tridimensional de la banda de energía  $\varepsilon$  que intersecta el plano en esa posición de  $\mathbf{k}$ . La intersección entre ambos define el área transversal correspondiente, la cual, a su vez, debe ajustarse a la condición impuesta por la regla de cuantización.

Por lo tanto, el número total de niveles que presenta el sistema puede estimarse siguiendo el razonamiento basado en la regla de cuantización. Habrá un cierto número de áreas transversales que caben dentro del plano sin que la banda que las produce cruce la superficie de Fermi (FS), así como una última área transversal que se encuentra en el borde de la FS, pero aún contenida dentro de ella. La FS marca el límite máximo de niveles, ya que, por su definición, es el límite de la ocupación de estados. Es importante identificar cuál es el valor de  $a$  correspondiente a esa última sección y, en consecuencia, determinar el valor de  $r$  asociado, ya que más adelante se expone la importancia de la información que aporta ese nivel con la energía más alta.

Por último, al conectar entre sí las secciones transversales que comparten el mismo valor de  $r$  en planos contiguos, se obtiene una figura tridimensional conocida como tubo de Landau. Estos tubos no necesariamente se orientan en paralelo al campo magnético  $\mathbf{H}$ ; su geometría está determinada por la estructura electrónica del material, la cual define la dirección en la que se distribuyen dichos niveles cuantizados en el espacio recíproco.

**1.5.3. Fórmula de Lifshitz-Kosevich.** La fórmula de Lifshitz–Kosevich (LK) es una expresión analítica que surge de aplicar el concepto de tubos de Landau que gobiernan el sistema metálico y describe la parte oscilatoria del potencial termodinámico gran canónico del sistema. A partir de esta expresión se obtiene la información oscilatoria de la magnetización, incluyendo tanto su dependencia respecto al campo magnético como la amplitud de dichas oscilaciones. Su forma explícita es:

$$\tilde{\Omega} = \left(\frac{e}{2\pi c\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{\beta H^{\frac{5}{2}}}{\pi^2 (A'')^{\frac{1}{2}}} R_T R_D R_s \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{p^{\frac{5}{2}}} \cos\left[2\pi p \left(\frac{F}{H} - \frac{1}{2}\right) \pm \frac{\pi}{4}\right]. \quad (21)$$

Donde  $\beta = \frac{e\hbar}{cm}$  y  $m$  es la masa de ciclotrón asociada al movimiento del electrón en el espacio real. Los factores  $R_T$ ,  $R_D$  y  $R_s$  representan las reducciones de amplitud debidas a la temperatura, el tiempo de vida de los estados cuasiestacionarios y el espín, respectivamente.

$$R_T = \frac{2\pi^2 p k_B T / \beta H}{\sinh(2\pi^2 p k_B T / \beta H)}, \quad (22)$$

$$R_D = \exp(-2\pi^2 k_B x / \beta H), \quad (23)$$

$$R_s = \cos\left(\frac{1}{2} p \pi g \frac{m}{m_0}\right). \quad (24)$$

En la fórmula de Lifshitz–Kosevich aparece la magnitud física que constituye la herramienta de caracterización principal en este trabajo de grado, la frecuencia de las oscilaciones, denotada por  $F$  y referida en lo sucesivo como frecuencia dHvA. Esta solamente va a depender del tubo de Landau ocupado más cercano al nivel de Fermi, recordando que su forma está determinada por la geometría de las bandas electrónicas, tal como se indicó en una sección previa. Para visualizar este procedimiento, se considera dicho tubo de Landau biseccionado por una familia de planos

perpendiculares a la dirección del campo magnético, de manera que cada intersección define un área transversal distinta. Solo las áreas transversales de ese tubo que resultan extremales con respecto a sus vecinas, por encima y por debajo, contribuyen a las frecuencias observadas en las oscilaciones cuánticas. Bajo esta condición, la frecuencia dHvA se define mediante la siguiente expresión.

$$F = \frac{c\hbar}{2\pi e} A. \quad (25)$$

Donde  $A$  es un área extremal sobre la superficie de Fermi.

**1.5.4. Efecto De Haas-van Alphen** Este efecto se refiere al comportamiento oscilatorio en los valores de magnetización de un metal cuando se varía la magnitud de un campo magnético homogéneo al que el material está sometido, bajo la condición de que se encuentre a bajas temperaturas.

Utilizando la teoría del potencial termodinámico gran canónico se calcula utilizando la fórmula LK, la magnetización, descompuesta en su componente paralela y perpendicular a  $\mathbf{H}$ .

$$M_{\parallel} = - \left( \frac{\partial \tilde{\Omega}}{\partial H} \right)_{\zeta}, \quad M_{\perp} = - \frac{1}{H} \left( \frac{\partial \tilde{\Omega}}{\partial \theta} \right)_{\zeta, H}. \quad (26)$$

$$\tilde{M}_{\parallel} = - \left( \frac{e}{c\hbar} \right) \frac{2Fk_BTV}{(2\pi H A'')^{1/2}} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{\exp(-2\pi^2 p k_B x / \beta H) \cos[\frac{1}{2} p \pi g(m/m_0)]}{p^{1/2} \sinh(2\pi^2 p k_B T / \beta H)} \times \sin[2\pi p (\frac{F}{H} - \frac{1}{2}) \pm \frac{\pi}{4}], \quad (27)$$

$$\tilde{M}_{\perp} = - \frac{1}{F} \frac{\partial F}{\partial \theta} \tilde{M}_{\parallel}. \quad (28)$$

**1.5.5. Observación experimental de oscilaciones cuánticas** La observación experimental de oscilaciones cuánticas requiere condiciones físicas particulares, entre ellas bajas temperaturas, campos magnéticos intensos y monocristales de alta calidad. Bajo estas condiciones, el

movimiento electrónico transversal al campo magnético se cuantiza en niveles de Landau, permitiendo la aparición de oscilaciones periódicas asociadas a la estructura de la superficie de Fermi.

Las oscilaciones cuánticas pueden detectarse mediante diferentes técnicas experimentales. En el efecto de Haas–van Alphen (dHvA), las oscilaciones aparecen en la magnetización del material, mientras que en el efecto Shubnikov–de Haas (SdH) se manifiestan en propiedades de transporte, como la resistividad longitudinal. Ambos fenómenos poseen el mismo origen físico y permiten obtener información sobre las órbitas extremales de la superficie de Fermi.

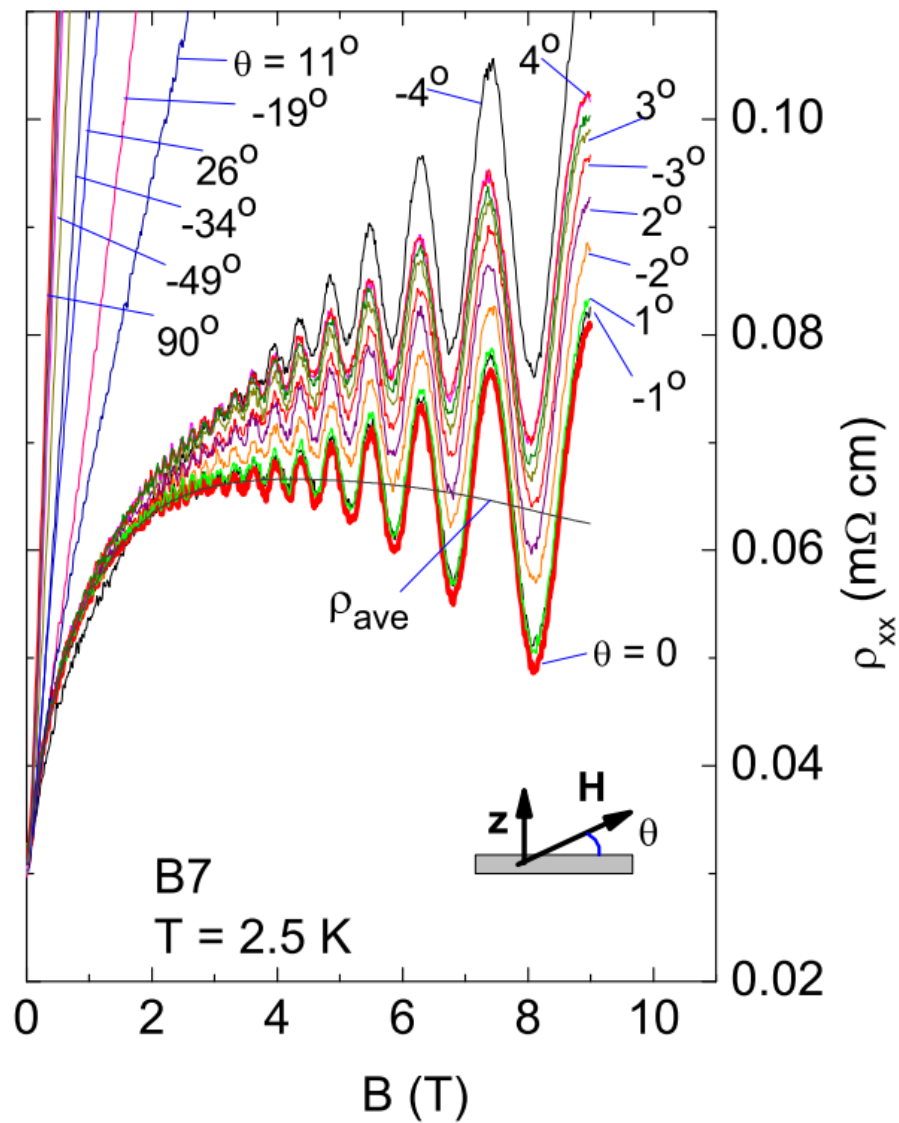
La Figura 8 muestra un ejemplo típico de mediciones experimentales de oscilaciones SdH en función del campo magnético aplicado para distintos ángulos de orientación. A medida que el campo magnético aumenta, las oscilaciones cuánticas se vuelven progresivamente más visibles sobre la medición del observable de resistividad longitudinal. Además, la variación angular de las curvas muestra que la respuesta magnetotransportiva no solo depende de la magnitud del campo, sino también de su orientación respecto a la muestra.

Aunque el presente trabajo no realiza mediciones experimentales, esta conexión permite ubicar las frecuencias calculadas dentro del contexto físico en el que normalmente se observan las oscilaciones cuánticas. En particular, las frecuencias obtenidas a partir de SKEAF representan las áreas extremales que, en un experimento real, podrían manifestarse como componentes oscilatorias en señales de magnetización o magnetotransporte. Por tanto, esta discusión experimental se incluye únicamente como una referencia conceptual para entender el tipo de observable al que se vinculan los cálculos desarrollados en esta tesis.

---

<sup>19</sup> Tian Liang et al. “Ultrahigh mobility and giant magnetoresistance in the Dirac semimetal Cd<sub>3</sub>As<sub>2</sub>”. En: *Nature materials* 14.3 (2015), págs. 280-284

Fig. 8. Ejemplo experimental de oscilaciones Shubnikov–de Haas observadas en la resistividad longitudinal  $\rho_{xx}$  como función del campo magnético  $B$  para diferentes orientaciones angulares del campo aplicado. La figura ilustra cómo las oscilaciones cuánticas pueden detectarse en mediciones de magnetotransporte a bajas temperaturas y cómo su señal aparece superpuesta sobre la medición de magnetorresistencia del material.



Fuente: adaptado de <sup>19</sup>.

## 1.6. ALGORITMO COMPUTACIONAL SKEAF

SKEAF es un algoritmo computacional desarrollado por P.M.C. Rourke y S.R. Julian, diseñado para extraer las frecuencias del efecto de Haas-van Alphen (dHvA) y las masas efectivas de los electrones. El algoritmo requiere como entrada un archivo que contenga la superficie de Fermi (FS).

Antes de describir su funcionamiento, es adecuado presentar algunas definiciones clave. Una órbita es el camino que resulta de la intersección de la FS con un plano perpendicular al campo magnético  $\mathbf{H}$ ; es decir, el conjunto de puntos  $\mathbf{k}$  que el electrón puede recorrer debido a la restricción de su trayectoria ciclotrónica.

Una órbita cerrada corresponde a una trayectoria que forma un ciclo completo dentro de una región de la FS. En la figura 9, la órbita I ilustra este tipo.

Una órbita extremal es una órbita cerrada cuya área transversal alcanza un valor máximo o mínimo local en comparación con las órbitas adyacentes. La órbita II en la figura 9 ejemplifica este concepto.

Por otro lado, una órbita abierta se extiende indefinidamente a lo largo de la FS sin cerrar su trayectoria. Este tipo de órbitas no contribuye a las oscilaciones dHvA, como se muestra en la órbita IV de la figura mencionada.

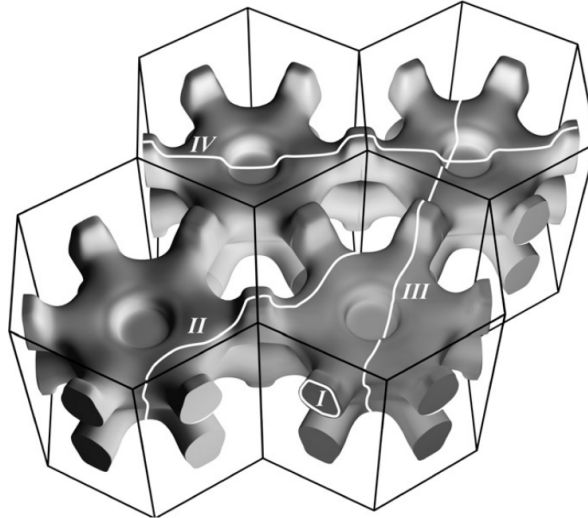
También es importante distinguir entre los dos tipos de órbitas extremales según el tipo de portador. Una órbita de electrón encierra puntos  $\mathbf{k}$  con estados ocupados, separándolos de los no ocupados. En contraste, una órbita de hueco rodea regiones de estados desocupados.

Una de las ideas fundamentales en las oscilaciones cuánticas es que las órbitas extremales de-

---

<sup>19</sup> Rourke, P. M. C., & Julian, S. R. (2012). *Numerical extraction of de Haas–van Alphen frequencies from calculated band energies*. *Computer Physics Communications*, 183(2), 324–332. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2011.10.015>

Fig. 9. Gráfico en la red recíproca y superficie de Fermi para  $UPt_3$ , donde se muestran distintos tipos de órbitas.



Fuente: adaptado de <sup>15</sup>.

terminan las frecuencias observadas del efecto dHvA, como lo establece la ecuación 25. Por lo tanto, el primer objetivo de SKEAF es identificar las áreas extremales a partir del diagrama de la FS, para una dirección dada del campo magnético  $\mathbf{H}$ .

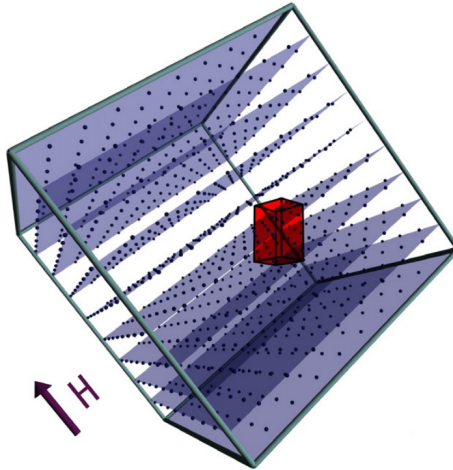
Con este fin, el algoritmo construye una supercelda cúbica de puntos  $\mathbf{k}$ , cuyos lados son cuatro veces más largos que el del vector recíproco más grande. Esta supercelda se alinea con la dirección de  $\mathbf{H}$ , como se muestra en la figura 10. El uso de una celda tan grande es necesario porque pueden existir órbitas cerradas que surgen de la unión de múltiples celdas recíprocas, como ocurre con las órbitas II y IV de la figura 9.

Los datos de la celda recíproca se asignan a la supercelda mediante transformaciones afines. Luego, un algoritmo iterativo desarrollado por los autores detecta las órbitas presentes en toda la supercelda para un mismo ángulo del campo magnético.

Una vez detectadas, no solo se almacenan los puntos de cada órbita, sino que también se calcula la pendiente de la energía en dos componentes: una paralela a la FS,  $(\frac{dE}{dk_{\parallel}})_i$ , y otra perpendicular,

$(\frac{dE}{dk_{\perp}})_i$ . Estas pendientes serán utilizadas más adelante para calcular la masa efectiva.

Fig. 10. Supercelda utilizada en el algoritmo SKEAF



Fuente: adaptado de <sup>15</sup>.

Después de extraer las órbitas, SKEAF reconstruye la superficie de Fermi. No obstante, en muchos materiales, la FS puede estar compuesta por múltiples hojas o secciones. Un ejemplo de ello son los cilindros centrales observables en la figura 11. Por tanto, puede haber múltiples intersecciones entre la FS y el plano perpendicular a **H**. El algoritmo se encarga de agrupar las órbitas que pertenecen a una misma hoja.

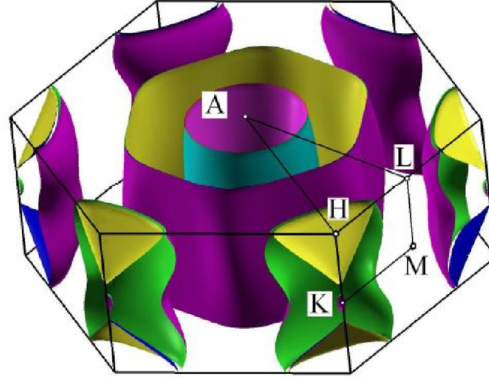
Posteriormente, dentro de cada grupo, se identifican las órbitas extremales. Estas se organizan por frecuencia y, si dos órbitas presentan frecuencias dentro de un margen especificado por el usuario (por defecto, 1 %), se consideran como copias múltiples de la misma órbita.

Este proceso culmina en una representación gráfica de las frecuencias dHvA en función del ángulo del campo magnético, como se observa en las figuras 12 las cual presentan las frecuencias dhva detectadas por SKEAF para 4 tipos de superficies.

---

<sup>20</sup> IR Shein y AL Ivanovskii. "Electronic band structure, Fermi surface, and elastic properties of new 4.2 K

Fig. 11. Superficie de Fermi del *SrPtAs*, donde se observan múltiples hojas.



Fuente: adaptado de <sup>20</sup>.

Además de las frecuencias dHvA, otra magnitud fundamental obtenida a partir de las órbitas extremales es la masa efectiva ciclotrón. Esta cantidad describe la respuesta dinámica de los portadores dentro del cristal y constituye una medida de cómo la estructura de bandas modifica el comportamiento de los electrones.

En la teoría semiclasica de oscilaciones cuánticas, la masa efectiva se relaciona con la variación del área extremal de la superficie de Fermi respecto a la energía mediante la expresión,

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2\pi} \frac{\partial A}{\partial E}, \quad (29)$$

donde  $A(E)$  corresponde al área de una órbita electrónica cerrada en el espacio recíproco para una energía dada. Esta relación no se restringe únicamente a las órbitas localizadas exactamente sobre el nivel de Fermi, sino que puede aplicarse a cualquier órbita cerrada asociada a una superficie de energía constante. En el caso particular de las oscilaciones dHvA, la ecuación se evalúa sobre las órbitas extremales que pertenecen a la superficie de Fermi. La ecuación muestra que la masa efectiva depende directamente de cómo cambia geoméricamente la órbita electrónica al modificar ligeramente la energía<sup>16</sup>.

---

superconductor SrPtAs from first-principles calculations". En: *arXiv preprint arXiv:1105.2386* (2011)

Por otra parte, la velocidad de grupo de los electrones dentro de una banda está dada por

$$v(k) = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E(k), \quad (30)$$

lo que implica que el gradiente de energía en el espacio recíproco controla la movilidad local de los portadores sobre la superficie de Fermi. En regiones donde las bandas electrónicas son poco dispersivas, el gradiente  $\nabla_k E$  es pequeño, lo que implica velocidades de grupo reducidas y, en consecuencia, masas efectivas más grandes. Por el contrario, bandas altamente dispersivas producen velocidades mayores y masas efectivas menores<sup>21</sup>.

A partir de estas relaciones, SKEAF implementa una formulación numérica discreta para calcular la masa efectiva promedio a lo largo de cada órbita extremal detectada sobre la superficie de Fermi. La expresión utilizada por el código es

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2\pi m_e} \sum_{i=1}^{N-1} \frac{\sqrt{(x_{FS,i+1} - x_{FS,i})^2 + (y_{FS,i+1} - y_{FS,i})^2}}{\left| \frac{dE}{dk} \right|_i}, \quad (31)$$

donde  $m_e$  es la masa del electrón libre y la suma se realiza sobre los distintos puntos discretizados que conforman la órbita sobre la superficie de Fermi. El término del numerador representa un elemento diferencial de longitud sobre la trayectoria de una órbita electrónica, mientras que  $\left| \frac{dE}{dk} \right|_i$  corresponde al módulo local de la pendiente de energía sobre la órbita.

Desde el punto de vista físico, esta ecuación puede interpretarse como una suma de contribuciones locales asociadas al movimiento electrónico sobre la superficie de Fermi. Regiones donde la energía varía lentamente con el momento contribuyen más fuertemente a la masa efectiva, mientras que regiones más dispersivas generan contribuciones menores. En consecuencia, la masa efectiva obtenida mediante oscilaciones dHvA proporciona información directa sobre la geometría de la superficie de Fermi y sobre la naturaleza dinámica de los portadores presentes en cada pocket electrónico.

---

<sup>21</sup> Charles Kittel y Paul McEuen. *Introduction to solid state physics*. John Wiley & Sons, 2018

### 1.6.1. Relación entre la dependencia angular de la frecuencia dHvA y la geometría de los bolsillos

Las curvas  $F(\theta)$  y  $F(\phi)$  obtenidas con SKEAF permiten inferir la geometría de los pockets de la superficie de Fermi a través de la relación de Onsager,  $F \propto A_{\text{ext}}$ , de modo que la forma de  $F(\theta)$  o  $F(\phi)$  refleja cómo varía el área extremal  $A_{\text{ext}}$  al rotar la dirección de muestreo. De ahí que se observen patrones muy claros en los resultados asociados a geometrías simples de pocket. Primero, cuando la frecuencia se mantiene aproximadamente constante con el ángulo, es decir, cuando la curva se asemeja a una línea casi horizontal, esto sugiere un pocket cercano a una esfera (figura 12A), ya que el área extremal prácticamente no cambia al rotar la dirección de muestreo. Segundo, cuando la curva presenta un comportamiento oscilatorio, se obtiene una señal característica de pocket con carácter elipsoidal (figura 12B). Tercero, cuando la frecuencia aumenta exponencialmente indica que el pocket tiene geometría de tubo (figura 12C), pues el área transversal aumenta en direcciones de muestreo paralelas al área abierta del tubo. Por último, también puede existir el caso de pockets que poseen más de un área extremal en una misma dirección de medición, como se presenta en la figura 12D).

### 1.7. TEOREMA DE LUTTINGER.

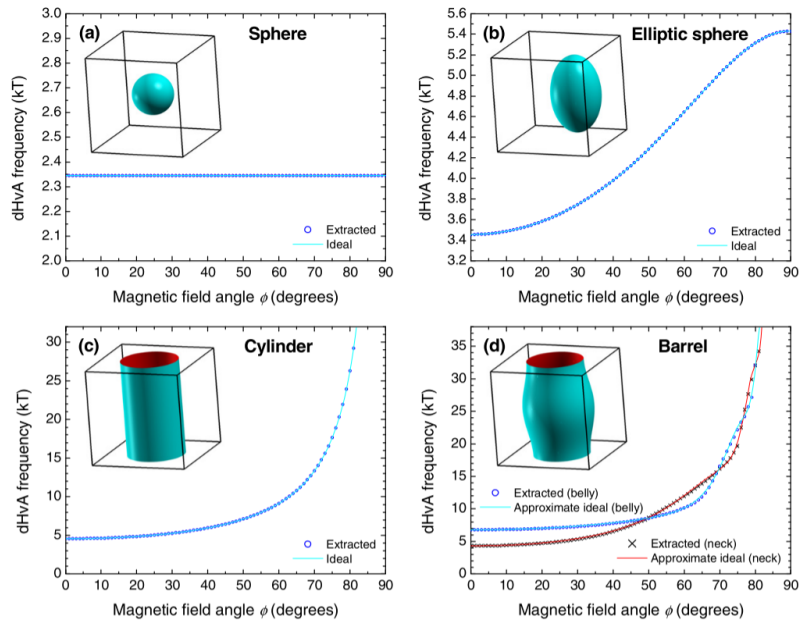
El teorema de Luttinger dice que el número de electrones de un sistema está relacionado con el volumen que ocupan los estados electrónicos en el espacio  $\mathbf{k}$ . Lo interesante es que este volumen no cambia cuando se activan las interacciones, como las interacciones electrón-electrón y electrón-fonón, siempre y cuando se conserve el número de partículas.

La fórmula que lo resume es:

$$\frac{1}{(2\pi)^D} \int_{G(\mathbf{k}, \omega=0) > 0} d^D \mathbf{k} = \frac{N}{2V} \quad (32)$$

Ahí aparece la función de Green,  $G(\mathbf{k}, \omega)$ , que es una herramienta que describe cómo se propaga un electrón en el sistema cuando se le agrega una perturbación. En otras palabras, da información sobre la probabilidad de que una partícula con cierto momento  $\mathbf{k}$  y energía  $\omega$  pueda existir en el sistema. Cuando evaluamos esta función en  $\omega = 0$ , básicamente estamos viendo qué estados están activos justo en el nivel de Fermi.

Fig. 12. Ejemplos ideales de la dependencia angular de la frecuencia dHvA para distintas geometrías de pockets de una superficie de Fermi: (A) esfera, (B) elipsoide, (C) cilindro o tubo y (D) tubo con una región abultada de carácter elipsoidal. Estos patrones sirven como guía cualitativa para interpretar curvas  $F$  vs. ángulo obtenidas con SKEAF.



Fuente: adaptado de <sup>15</sup>.

La condición  $G(\mathbf{k}, \omega = 0) > 0$  selecciona los estados ocupados, y eso define una región del espacio  $\mathbf{k}$  que se puede interpretar como la parte “dentro” de la superficie de Fermi generalizada.

A la derecha aparece  $N/V$ , que es la densidad de partículas por unidad de volumen, y el  $1/2$  es porque se cuenta solo un espín. Si se consideran ambos espines, se multiplica por 2.

Este teorema es útil porque dice que, a pesar de las interacciones, la estructura de la superficie de Fermi se conserva, y eso permite usarla para estudiar propiedades electrónicas sin necesidad de conocer todos los detalles del sistema.

## 1.8. ONDAS DE DENSIDAD DE CARGA (CDWS)

Gran parte del contenido teórico desarrollado en esta sección ha sido tomado de las obras de George Grüner, especialmente su libro *Density Waves in Solids* (1994)<sup>22</sup> y su artículo de revisión *The Dynamics of Charge-Density Waves* (1988)<sup>23</sup>. Estos textos constituyen una referencia fundamental para el estudio de las CDWs y han servido como base para la organización y redacción del presente apartado.

**1.8.1. Concepto general** Las ondas de densidad de carga (CDWs, por sus siglas en inglés) son estados colectivos que emergen en ciertos materiales cuando los electrones se organizan de manera periódica en el espacio, acompañados por una distorsión de la red cristalina. Este tipo de ordenamiento surge por la interacción entre los electrones y los fonones.

Lo que hace especiales a estos estados es que rompen la simetría de traslación del sistema,

---

<sup>22</sup> George Gruner. *Density waves in solids*. CRC press, 2018

<sup>23</sup> G. Gruner. “The dynamics of charge-density waves”. En: *Rev. Mod. Phys.* 60 (4 1988), págs. 1129-1181. DOI: 10.1103/RevModPhys.60.1129

dando lugar a una modulación periódica en la densidad electrónica:

$$\rho(x) = \rho_0 + \rho_1 \cos(2k_F x + \phi), \quad (33)$$

donde  $\rho_0$  es la densidad promedio,  $\rho_1$  la amplitud de la modulación,  $k_F$  el vector de Fermi y  $\phi$  una fase que puede variar en el espacio y el tiempo. Esta estructura describe la base sobre la que se construye toda la teoría de CDWs: un condensado de pares electrón-hueco que se propaga con una periodicidad determinada por la configuración electrónica del material.

Lo interesante es que estas ondas no surgen por azar. Existen mecanismos físicos que favorecen su formación en condiciones específicas. Para entenderlos, conviene empezar desde un modelo simple: el gas de electrones unidimensional.

**1.8.2. Modelo del gas de electrones unidimensional** Imaginemos un alambre muy delgado por el que los electrones solo pueden moverse hacia adelante o hacia atrás. Este sistema, conocido como gas de electrones unidimensional, tiene una relación de dispersión parabólica:

$$\epsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (34)$$

El nivel de energía de Fermi es:

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{N_0 \pi}{2L} \right)^2 = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}, \quad (35)$$

donde  $N_0$  es el número total de electrones,  $L$  es la longitud del alambre y  $m$  la masa del electrón libre.

Cuando el sistema es sometido a un potencial externo, como una vibración de la red, se puede inducir una carga en respuesta. La eficiencia con la que esto ocurre está cuantificada por la función de respuesta de Lindhard <sup>24</sup>:

---

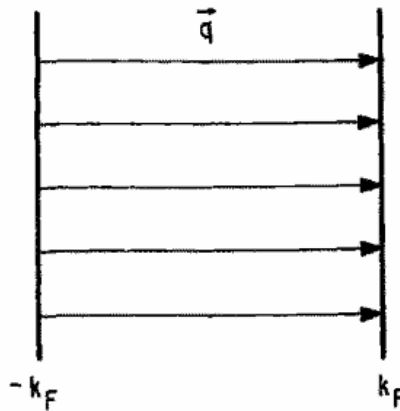
<sup>24</sup> Neil W Ashcroft y ND Mermin. "Solid state". En: *Physics (New York: Holt, Rinehart and Winston) Appen-*

$$\chi(q) = \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{f_k - f_{k+q}}{\epsilon_k - \epsilon_{k+q}}, \quad (36)$$

donde  $f_k$  es la función de ocupación de Fermi. Esta función indica qué tan fácil es para el sistema crear una densidad inducida bajo una perturbación de onda  $q$ .

En el caso unidimensional, la función de respuesta se ve fuertemente influenciada por las características de la superficie de Fermi, que en este modelo se reduce a dos puntos:  $\pm k_F$ . El numerador de la integral,  $f_k - f_{k+q}$ , no es nulo cuando se conectan pares de estados ocupados con desocupados. Por otro lado, el denominador,  $\epsilon_k - \epsilon_{k+q}$ , tiende a cero cuando los estados involucrados tienen energías muy similares, lo que provoca una divergencia en la función. Estas dos condiciones se cumplen cuando la perturbación tiene un vector de onda  $q = 2k_F$  y se conecta estados en los planos opuestos de la FS, lo que da lugar a un pico en  $\chi(q)$ . Este comportamiento divergente representa la manifestación matemática del fenómeno conocido como **anidamiento perfecto**, ilustrado en el diagrama de la superficie de Fermi en la figura 13, y constituye un elemento clave en la formación de inestabilidades electrónicas como las ondas de densidad de carga.

Fig. 13. Superficie de Fermi para el gas de electrones libres unidimensional. Las flechas indican perturbaciones de magnitud  $2k_f$  y donde todas conectan ambos planos simbolizan el anidamiento perfecto.



Fuente: adaptado de <sup>22</sup>.

*dix C 1* (1976)

En una dimensión,  $\chi(q)$  muestra una divergencia logarítmica en  $q = 2k_F$ :

$$\chi(q) \sim -\ln \left| \frac{q + 2k_F}{q - 2k_F} \right|. \quad (37)$$

La relación de la carga inducida con la función de respuesta y el potencial  $\phi(\vec{q})$  es.

$$\rho^{ind}(\vec{q}) = \chi(\vec{q})\phi(\vec{q}) \quad (38)$$

La divergencia de la función de respuesta significa que el sistema es extremadamente sensible a perturbaciones con ese valor de momento. De hecho, se traduce en una redistribución de la densidad de carga en todo el hilo si se analiza la información de la fórmula 38. Esta describe la carga inducida en el espacio recíproco. Por lo tanto mediante la transformada de Fourier de una función que diverge en  $q = 2k_F$ , quiere decir que la carga está distribuida periódicamente sobre el hilo con una longitud de onda de.

$$\lambda_0 = \frac{\pi}{k_F}. \quad (39)$$

Pero este comportamiento se diluye a medida que se aumenta la dimensionalidad del sistema ya que la función de respuesta no diverge. Por eso, las CDWs aparecen con más facilidad en materiales cuasi-unidimensionales, cuya topología de la superficie de Fermi se parece a la del caso 1D

La importancia de este modelo no está solo en su simplicidad. Permite anticipar, desde la teoría, qué tipo de geometría electrónica favorece la aparición de CDWs.

---

<sup>24</sup> Grüner, G. (2018). *Density waves in solids*. CRC Press.

## 2. METODOLOGÍA Y DETALLES COMPUTACIONALES

### 2.1. CÁLCULOS DFT

Los cálculos de estructura electrónica de TaTe<sub>4</sub> y NbTe<sub>4</sub> se realizaron dentro del marco de la teoría del funcional de la densidad (DFT). Para los casos en los que no se consideró el acoplamiento espín-órbita (SOC) se empleó DFT convencional, mientras que para los cálculos que incluyen SOC se utilizó la versión dependiente del espín (SDFT). Estos últimos se llevaron a cabo mediante el método PAW (Projector Augmented Wave)<sup>25</sup>, tal como está implementado en el paquete VASP<sup>26,27,28,29,30</sup>. En todos los casos se empleó el funcional de intercambio-correlación PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) en la aproximación GGA (Generalized Gradient Approximation)<sup>31</sup>, con las versiones de pseudopotenciales PAW\_PBE especificadas para cada átomo:

- **Ta:** PAW\_PBE Ta\_pv (07Sep2000), configuración de valencia  $5p^6 6s^2 5d^3$ ,  $Z_{\text{val}} = 11$ ,  $E_{\text{NMAX}} = 223,667$  eV.
- **Nb:** PAW\_PBE Nb\_sv (25May2007), configuración de valencia  $4p^6 5s^1 4d^4$ ,  $Z_{\text{val}} = 13$ ,  $E_{\text{NMAX}} =$

- 
- <sup>25</sup> Peter E Blöchl. "Projector augmented-wave method". En: *Physical review B* 50.24 (1994), pág. 17953
- <sup>26</sup> G. Kresse y J. Hafner. "Ab initio molecular dynamics for liquid metals". En: *Phys. Rev. B* 47 (1993), págs. 558-561. DOI: 10.1103/PhysRevB.47.558
- <sup>27</sup> G. Kresse y J. Furthmüller. "Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set". En: *Computational Materials Science* 6.1 (1996), págs. 15-50. DOI: 10.1016/0927-0256(96)00008-0
- <sup>28</sup> G. Kresse y J. Furthmüller. "Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set". En: *Phys. Rev. B* 54 (1996), págs. 11169-11186. DOI: 10.1103/PhysRevB.54.11169
- <sup>29</sup> Georg Kresse y Jurgen Hafner. "Norm-conserving and ultrasoft pseudopotentials for first-row and transition elements". En: *Journal of Physics: Condensed Matter* 6.40 (1994), pág. 8245
- <sup>30</sup> Georg Kresse y Daniel Joubert. "From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method". En: *Physical review b* 59.3 (1999), pág. 1758
- <sup>31</sup> John P Perdew et al. "Atoms, molecules, solids, and surfaces: Applications of the generalized gradient approximation for exchange and correlation". En: *Physical review B* 46.11 (1992), pág. 6671

293,235 eV.

- **Te:** PAW\_PBE Te (08Apr2002), configuración de valencia  $5s^25p^4$ ,  $Z_{\text{val}} = 6$ ,  $E_{\text{NMAX}} = 174,982$  eV.

En todos los casos, la energía de corte para las ondas planas se fijó en 600 eV, garantizando convergencia de la energía total por debajo de  $10^{-6}$  eV y fuerzas residuales menores a  $10^{-5}$  eV/Å (EDIFFG = -1E-5) tras la relajación estructural. Se activó la corrección de proyecciones no esféricas (LASPH = .TRUE.) y el refinamiento de cuadrícula (ADDGRID = .TRUE.) para mejorar la precisión los calculos dentro de las esferas de augmentación.

**Configuraciones específicas para la superficie de Fermi** Se realizaron cuatro cálculos independientes con el fin de obtener las superficies de Fermi de los siguientes sistemas.

#### 1. TaTe<sub>4</sub> sin acoplamiento espín-órbita (SOC)

- Malla k:  $15 \times 15 \times 15$  centrada en  $\Gamma$ .
- SOC desactivado (LSORBIT = .FALSE.).

#### 2. TaTe<sub>4</sub> con SOC

- Malla k:  $11 \times 11 \times 11$  centrada en  $\Gamma$ .
- SOC activado (LSORBIT = .TRUE.) con eje de cuantización  $S_{\text{axis}} = (0, 0, 1)$ .

#### 3. NbTe<sub>4</sub> sin SOC

- Malla k:  $11 \times 11 \times 11$  centrada en  $\Gamma$ .
- SOC desactivado (LSORBIT = .FALSE.).

#### 4. NbTe<sub>4</sub> con SOC

- Malla k:  $11 \times 11 \times 11$  centrada en  $\Gamma$ .
- SOC activado (LSORBIT = .TRUE.) con eje de cuantización  $S_{\text{axis}} = (0, 0, 1)$ .

En todos los casos, la integración en el espacio recíproco se realizó con el esquema Monkhorst-Pack, usando tratamiento de ocupaciones  $ISMEAR = 1$  y anchura de smearing  $\sigma = 0,025852$  eV. Se empleó  $ISYM = -1$  para evitar la reducción automática de simetrías. Las energías de Kohn-Sham convergidas se evaluaron en cálculos no auto-consistentes ( $ICHARG = 11$ ,  $NSW = 0$ ) usando la misma malla  $k$  del cálculo SCF correspondiente ( $15 \times 15 \times 15$  para  $TaTe_4$  sin SOC y  $11 \times 11 \times 11$  para los otros tres casos). Los eigenvalores obtenidos se usaron como entrada de SKEAF para extraer las áreas extremales y las frecuencias de oscilaciones cuánticas para diferentes orientaciones del campo magnético.

## 2.2. CONSTRUCCIÓN DE SUPERFICIES DE FERMI.

La construcción de las superficies de Fermi (FS) parte de los cálculos de estructura electrónica realizados con VASP. En estos cálculos, el archivo de salida PROCAR proporciona, para cada punto  $k$  de la malla, sus coordenadas en la primera zona de Brillouin, seguidas por el autovalor de energía de cada una de las bandas existentes para ese punto, junto con su ocupación electrónica y el peso asociado a dicho  $k$ -punto. En consecuencia, PROCAR contiene la información necesaria para identificar los puntos que pertenecen a la superficie de Fermi.

Para llevar a cabo esta identificación, se emplea como criterio de filtrado el valor de la energía de Fermi, el cual es determinado por el propio VASP. De este modo, únicamente se seleccionaron las bandas que cruzan, o se encuentran lo suficientemente cerca, del nivel de Fermi, ya que estas son las relevantes para el análisis posterior de oscilaciones cuánticas.

Una vez definidas las bandas de interés, la información de sus energías se transforma al formato `.bxsf`, perteneciente al programa *XCrySDen*<sup>32</sup>. Este formato almacena los valores de energía en una malla de puntos  $k$  equivalente a la utilizada por VASP. Por tanto, la conversión a `.bxsf` se realiza mediante herramientas de post-proceso que adaptan el estilo de malla de VASP al requerido

---

<sup>32</sup> Anton Kokalj. "XCrySDen—a new program for displaying crystalline structures and electron densities". En: *Journal of Molecular Graphics and Modelling* 17.3 (1999), págs. 176-179. DOI: [https://doi.org/10.1016/S1093-3263\(99\)00028-5](https://doi.org/10.1016/S1093-3263(99)00028-5)

por BXSf.

Finalmente, el archivo `.bxsf` resultante constituye la entrada principal para SKEAF, el cual requiere que la malla  $k$  sea lo suficientemente fina como para capturar con precisión la geometría de la FS.

### 2.3. SKEAF Y ANÁLISIS ANGULAR DHVA

El análisis de las oscilaciones cuánticas del tipo de Haas–van Alphen (dHvA) se realizó utilizando el algoritmo SKEAF (Supercell K-space Extremal Area Finder), un algoritmo diseñado específicamente para identificar las órbitas extremales de la superficie de Fermi (FS) y calcular las frecuencias de oscilación asociadas.

El programa genera principalmente dos tipos de resultados. El primero corresponde a la representación de la frecuencia dHvA en función de un parámetro angular que describe la orientación considerada para el muestreo. En esta tesis, dicha orientación se introduce de manera análoga a la dirección del campo magnético en un experimento dHvA, sin simular explícitamente su magnitud, pues el cálculo de la frecuencia depende únicamente del área extremal de la superficie de Fermi perpendicular a esa dirección. El mosaico de figuras 16 presentan este tipo de resultado: en ellas se observa la evolución angular de cada bolsillo de la superficie de Fermi, cuyas ramas aparecen como funciones continuas de  $\theta$  o  $\phi$  (coordenadas esféricas). Además, la forma funcional de cada curva proporciona información directa sobre la geometría de los pockets.

El segundo tipo de cálculo consiste en fijar un valor particular del ángulo de rotación  $\gamma$ , a partir de este, extraer las coordenadas de los puntos que constituyen las órbitas detectadas para dicha orientación del campo. Esta información es esencial para representar posteriormente las órbitas directamente sobre la superficie de Fermi. De este modo, es posible identificar con mayor certeza qué bolsillo es responsable de una frecuencia dada, pues la órbita puede visualizarse trazada sobre la propia superficie, delimitando el contorno del bolsillo asociado. Un ejemplo de este tratamiento de datos se presenta en las gráficas 19–22.

Para garantizar la calidad de los resultados, en los cálculos realizados con SKEAF fue necesario establecer cuatro condiciones fundamentales. En primer lugar, se establece la frecuencia dHvA mínima detectable, cuyo valor en este trabajo se fijó en 161,9T. Además, para poder identificar cuándo diferentes trayectorias corresponden en realidad a la misma órbita, se utiliza un criterio de semejanza en frecuencia, que permite promediarlas únicamente si la diferencia relativa entre ellas no supera el 1 %. De forma complementaria, también se incorpora un criterio espacial, que compara las coordenadas promedio de las órbitas y solo permite combinarlas si la separación relativa no excede el 5 % de la longitud del lado de la celda unitaria recíproca (RUC). Finalmente, se contempla la posibilidad de incluir las órbitas extremas cercanas a las paredes de la supercelda; en este estudio se decidió permitir las.

Como resultado de este procedimiento, SKEAF permitió obtener información clave como las masas efectivas de los portadores, la naturaleza de cada pocket (tipo electrón o tipo hueco) y el número de copias encontradas por órbita.

## 2.4. MÉTODO DE APLICACIÓN DEL TEOREMA DE LUTTINGER

El volumen de cada pocket se estimó como una fracción del volumen de la primera zona de Brillouin,  $V_{BZ}$ , a partir de las energías de banda  $E_n(\mathbf{k})$  muestreadas en una malla uniforme de  $k$ -puntos  $N_1 \times N_2 \times N_3$  (reconstruida desde PROCAR). Para cada banda  $n$  se definió un enmascaramiento binario  $M_n(\mathbf{k})$  usando como criterio una tolerancia  $\Delta E$  alrededor del nivel de Fermi  $E_F$ :

$$M_n(\mathbf{k}) = \begin{cases} 1, & |E_n(\mathbf{k}) - E_F| \leq \Delta E, \\ 0, & |E_n(\mathbf{k}) - E_F| > \Delta E. \end{cases} \quad (40)$$

De este modo, los puntos que cumplen el criterio energético se marcan como 1 y los que no lo cumplen como 0, identificando numéricamente la región de interés asociada a la superficie de Fermi.

Para identificar los pockets se aplicó un algoritmo de etiquetado de componentes conexas (connected-

component labeling) sobre la máscara  $M_n(\mathbf{k})$ , implementado mediante una búsqueda tipo flood-fill (BFS/DFS). El procedimiento parte de un punto marcado  $M_n = 1$  no visitado, explora iterativamente todos sus vecinos también marcados y asigna a todo el conjunto la misma etiqueta; el proceso se repite hasta agotar los puntos marcados. Cada etiqueta final corresponde a un pocket, es decir, a un conjunto de puntos conectados dentro de la rejilla según la vecindad elegida, por ejemplo 6, 18 o 26 vecinos en 3D.

Además, esta conectividad se evaluó incorporando la periodicidad del espacio recíproco. En términos discretos, esto equivale a envolver los índices: si un punto está en el borde  $i = 0$ , su vecino en dirección  $-x$  se busca en  $i = N_1 - 1$  y análogamente en  $y$  y  $z$ . Algunos pockets se extienden más allá de la celda recíproca. Por esta razón, es necesario incorporar la periodicidad del espacio recíproco. En consecuencia, se implementó un criterio de conectividad periódica que permite asociar y unir dichas componentes a través de las fronteras de la rejilla, reconstruyendo así cada pocket como un objeto único.

Una vez identificado cada pocket  $p$ , su volumen  $V_p$  se estimó mediante un conteo volumétrico sobre la rejilla. La discretización uniforme implica que el volumen total  $V_{BZ}$  se reparte en elementos iguales, por lo que a cada punto de la malla se le asocia un volumen elemental constante

$$\Delta V_k = \frac{V_{BZ}}{N_1 N_2 N_3}. \quad (41)$$

Si el pocket  $p$  contiene  $N_p$  puntos marcados, considerando la conectividad con la periodicidad, entonces su volumen se aproxima como

$$V_p \approx N_p \Delta V_k. \quad (42)$$

De manera equivalente, su fracción respecto a la zona de Brillouin queda dada por

$$\frac{V_p}{V_{BZ}} \approx \frac{N_p}{N_1 N_2 N_3}. \quad (43)$$

En el caso de pockets que aparecen partidos dentro de la celda, es importante distinguir entre los fragmentos locales, es decir, las porciones dentro de la celda recíproca, y el pocket periódico completo el cual corresponde a la unión de todos los fragmentos pertenecientes a celdas vecinas. El volumen reportado  $V_p$  corresponde al pocket completo.

Para clasificar cada pocket como cerrado o abierto, se aplicó una regla basada en la periodicidad. Un pocket se considera cerrado si al unir sus fragmentos pertenecientes a las celdas vecinas se forma una superficie cerrada. En contraste, un pocket se considera abierto si, al unir sus fragmentos nunca se logra formar una superficie cerrada. El factor responsable de esto último es que la geometría del fragmento permite la conexión con el fragmento equivalente de la celda vecina.

Finalmente, el teorema de Luttinger se aplicó a cada pocket a través de su fracción volumétrica. La contribución a la densidad de portadores por celda asociada al pocket  $p$  se calculó como

$$n_{\text{cell},p} = s_p \frac{V_p}{V_{BZ}}, \quad (44)$$

donde  $s_p = +1$  para pockets tipo electrón y  $s_p = -1$  para pockets tipo hueco. La densidad volumétrica se obtuvo usando el volumen real de la celda  $V_{\text{real}}$  extraído de POSCAR como

$$n_{\text{vol},p} = \frac{n_{\text{cell},p}}{V_{\text{real}}}. \quad (45)$$

### 3. RESULTADOS Y ANÁLISIS.

El contenido de este capítulo se organiza en cuatro bloques principales. En primer lugar, se presentan las superficies de Fermi (FS) calculadas para  $\text{TaTe}_4$  y  $\text{NbTe}_4$ , tanto con como sin acoplamiento espín-órbita (SOC), destacando la morfología general de cada hoja, la anisotropía asociada a su carácter cuasi-1D y la identificación de los distintos pockets presentes en cada superficie de Fermi. Posteriormente, se muestran las dependencias angulares de las frecuencias dHvA obtenidas con el algoritmo SKEAF, las cuales permiten identificar las órbitas extremales responsables de las oscilaciones cuánticas. En la tercera parte, se analizan las masas efectivas extraídas de dichas órbitas y se presentan las densidades de portadores estimadas mediante el teorema de Luttinger, proporcionando así una visión integral del transporte electrónico en ambos compuestos. Finalmente, se presentan las representaciones gráficas de las órbitas extremales superpuestas sobre las superficies de Fermi, mostrando únicamente las órbitas asociadas a las masas efectivas más altas obtenidas para cada uno de los tres pockets identificados en los cálculos.

#### 3.1. SUPERFICIES DE FERMI

En esta sección se presentan las superficies de Fermi (FS) calculadas a partir de los resultados obtenidos mediante teoría funcional de la densidad (DFT), empleando el código VASP, para los cuatro casos considerados:  $\text{TaTe}_4$  y  $\text{NbTe}_4$ , cada uno con y sin la presencia del acoplamiento espín-órbita. Para cada caso se graficaron las superficies de Fermi en tres celdas recíprocas vecinas, con el fin de visualizar con mayor claridad la conectividad por periodicidad y facilitar la identificación de los pockets que se describirán más adelante. La celda recíproca de estos compuestos presenta una forma cuadrada, producida por la simetría tetragonal de los cristales. Lo

anterior se observa en la Figura 14, generada con el software de graficación PyProcar<sup>33,34</sup>, la cual muestra las cuatro gráficas correspondientes a los casos de estudio. Se observa que las cuatro superficies de Fermi obtenidas presentan una gran similitud entre sí. Exhiben una geometría fuertemente anisotrópica, ya que la forma de la superficie se mantiene similar en las direcciones  $b_1$  y  $b_2$ , pero cambia notablemente en la dirección  $b_3$ , donde se extienden las cadenas de la estructura cristalina.

Cada superficies de Fermi mostrada presenta las superficies cerradas que se denominan pockets. En todos los casos se distinguen tres pockets, que en adelante se denotarán como  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\delta^4$ . Esta nomenclatura se adopta debido a que, al comparar TaTe<sub>4</sub> y NbTe<sub>4</sub>, con y sin acoplamiento espín-órbita, los tres pockets conservan una morfología y una ubicación en el espacio recíproco esencialmente equivalentes. Ahora, al observar la figura, pueden identificarse claramente los tres pockets mencionados. El pocket  $\alpha$  se encuentra centrado en el punto de alta simetría  $A$  y presenta una forma de lóbulo aproximadamente esférico. Por su parte, el pocket  $\delta$  posee una geometría tipo cruz y está centrado en el punto de alta simetría  $M$ . Finalmente, el pocket  $\beta$  se ubica en el punto  $Z$  y presenta una geometría plana y en forma de cruz. En el caso del pocket  $\beta$ , esta disposición geométrica es análoga a la superficie de Fermi teórica de un gas de electrones unidimensional confinado en una red cristalina tipo cadena, ilustrada en la Figura 13. Esta analogía se fundamenta principalmente en dos características geométricas observables en las superficies de Fermi obtenidas para ambos compuestos.

La primera corresponde a la presencia de regiones aproximadamente planas y paralelas entre sí, orientadas perpendicularmente a la dirección  $b_3$ . Esta geometría implica que las velocidades de grupo de los portadores asociados a dichas regiones tienden a orientarse preferencialmente a lo

---

<sup>33</sup> Uthpala Herath et al. "PyProcar: A Python library for electronic structure pre/post-processing". En: *Computer Physics Communications* 251 (2020), pág. 107080. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2019.107080>

<sup>34</sup> Logan Lang et al. "Expanding PyProcar for new features, maintainability, and reliability". En: *Computer Physics Communications* 297 (2024), pág. 109063. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2023.109063>

largo de esa dirección, lo que evidencia un comportamiento electrónico marcadamente anisótropo<sup>35</sup>. Aunque este carácter plano se manifiesta de manera más pronunciada en el pocket  $\beta$ , el pocket  $\delta$  también presenta regiones parcialmente planas, lo que sugiere que ambos pockets conservan cierto grado de anisotropía asociado al carácter cuasi-unidimensional del sistema.

La segunda característica corresponde a la disposición aproximadamente opuesta y simétrica de estas regiones respecto al origen del espacio recíproco, en analogía con las dos ramas características localizadas en  $\pm k_F$  del modelo de gas de electrones libres unidimensional. En conjunto, estas similitudes geométricas refuerzan la analogía con el caso 1D y constituyen un indicio de comportamiento electrónico cuasi-unidimensional en TaTe<sub>4</sub> y NbTe<sub>4</sub>. Además, la existencia de regiones aproximadamente paralelas sobre la superficie de Fermi favorece posibles condiciones de anidamiento (*nesting*), las cuales suelen asociarse con la aparición de ondas de densidad de carga (CDW) en materiales cuasi-unidimensionales<sup>22</sup>.

Adicionalmente, el mosaico de la Figura 15 presenta la estructura de bandas correspondiente a cada uno de los sistemas en estudio. En cada una de estas gráficas, los cruces de las bandas con el nivel de Fermi se encuentran asociados a los distintos pockets de la superficie de Fermi. En particular, el pocket  $\delta$  se identifica mediante círculos de color negro, el pocket  $\beta$  con color verde, y el pocket  $\alpha$  con color rosado.

### 3.2. ANÁLISIS ANGULAR DE LAS FRECUENCIAS DHVA

El análisis angular de las frecuencias dHvA permite establecer una relación directa entre la geometría de la superficie de Fermi y las órbitas extremales obtenidas para distintas orientaciones de la dirección simulada del campo magnético. Para cada compuesto se realizaron dos barridos angulares independientes, cubriendo un rango total de 0° a 180°. En el primer barrido, el campo magnético se orienta inicialmente en la dirección del eje  $-a$ , luego rota hacia el eje  $b$  y finalmente hasta el eje  $a$ , completando los 180°. En el segundo barrido, el campo parte del eje  $-c$ , se desplaza

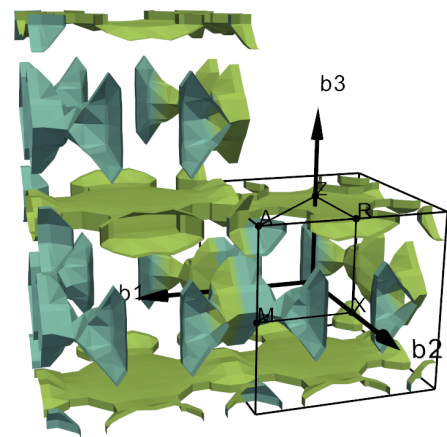
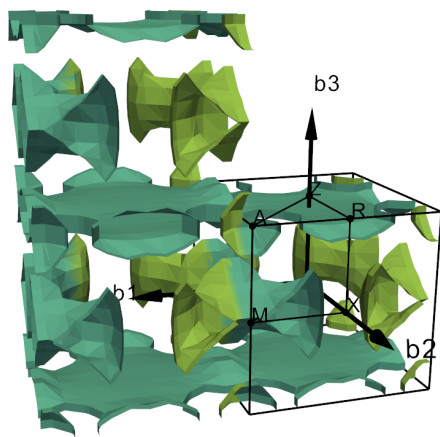
---

<sup>35</sup> Tapash Chakraborty. *Encyclopedia of condensed matter physics*. Elsevier Science & Technology, 2023

Fig. 14. Las figuras (a)–(d) muestran las superficies de Fermi de los compuestos  $\text{NbTe}_4$  y  $\text{TaTe}_4$ , con y sin acoplamiento espín–órbita (SOC). En cada una se grafican dos celdas recíprocas vecinas a la celda central, mostrando que los pockets están presentes en las fronteras de las celdas. Además, dado que  $\text{NbTe}_4$  y  $\text{TaTe}_4$  son compuestos isoestructurales e isoelectrónicos, es normal observar una geometría casi idéntica y el mismo número de pockets en todos los casos. Debido a esta similitud, utilizamos la misma notación para pockets similares en cada caso: el pocket  $\alpha$  está centrado en el punto de alta simetría  $A$ , el pocket  $\delta$  está centrado en  $M$ , y el pocket  $\beta$  está centrado en  $Z$ . Para este último pocket, aunque no se grafica la celda recíproca superior asociada al punto  $Z$ , debido a la periodicidad del espacio recíproco, las celdas vecinas mostradas hacia la izquierda permiten apreciar la forma completa del pocket  $\beta$ .

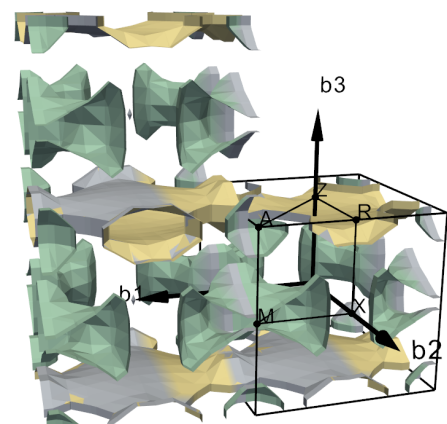
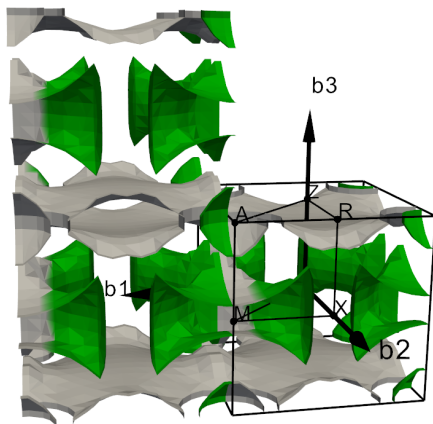
(a)  $\text{NbTe}_4$  sin SOC.

(b)  $\text{NbTe}_4$  con SOC.



(c)  $\text{TaTe}_4$  sin SOC.

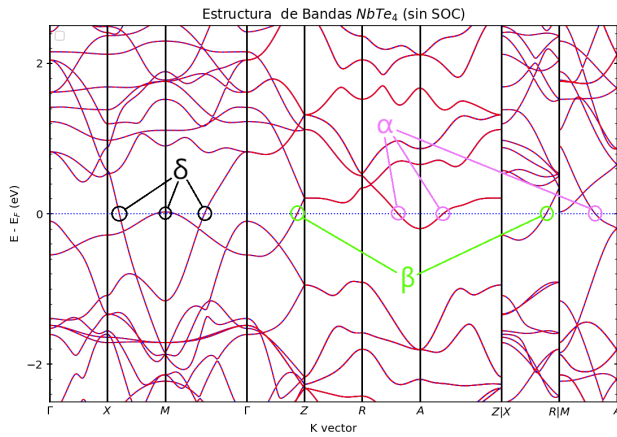
(d)  $\text{TaTe}_4$  con SOC.



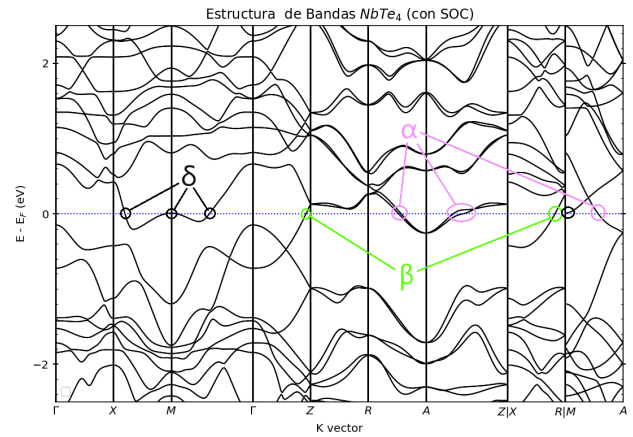
Fuente: elaboración propia a partir de los cálculos DFT realizados en este trabajo.

Fig. 15. Las figuras (a)–(d) muestran la estructura de bandas calculada para cada uno de los sistemas considerados. En cada panel se identifican los cruces de las bandas con el nivel de Fermi, los cuales se asocian a los distintos pockets de la superficie de Fermi. En particular, el pocket  $\delta$  se indica mediante círculos de color negro, el pocket  $\beta$  en color verde y el pocket  $\alpha$  en color rosado.

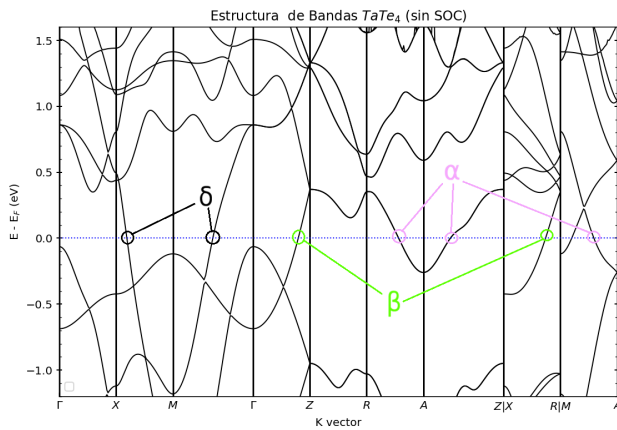
(a) NbTe<sub>4</sub> sin SOC.



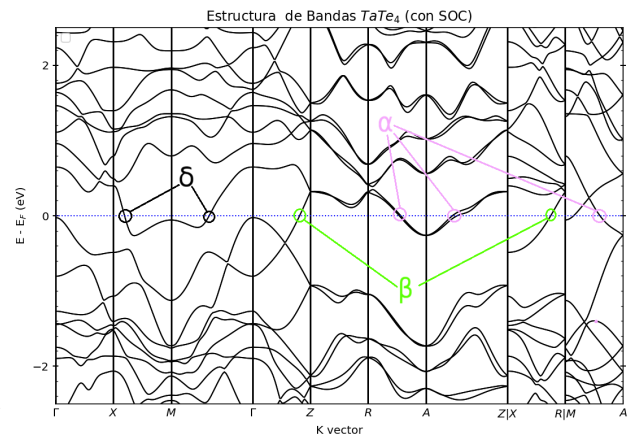
(b) NbTe<sub>4</sub> con SOC.



(c) TaTe<sub>4</sub> sin SOC.



(d) TaTe<sub>4</sub> con SOC.



Fuente: elaboración propia a partir de los cálculos DFT realizados en este trabajo.

nuevamente hacia el eje *b* y luego hasta el eje *c*, de modo que ambos barridos son perpendiculares entre sí. Este procedimiento garantiza una exploración completa de las órbitas extremales en los planos cristalográficos *ab* y *cb*, respectivamente.

Las figuras del mosaico 16 presentan las curvas de frecuencia dHvA en función del ángulo de rotación del campo magnético para TaTe<sub>4</sub> y NbTe<sub>4</sub>, con y sin acoplamiento espín-órbita (SOC). En cada gráfico se muestran las frecuencias calculadas (en Teslas, T) asociadas a los pockets  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\delta$ , el eje horizontal representa el ángulo de 0°–180° y el eje vertical la frecuencia dHvA. Cada punto corresponde a una órbita extremal identificada por SKEAF; el color indica el pocket al que pertenece (azul:  $\alpha$ , naranja:  $\beta$ , verde:  $\delta$ ) y la forma del marcador distingue el tipo de portador (círculos: electrones; cuadrados: huecos).

Esta dependencia angular muestra que la forma de las ramas de frecuencia dHvA es consistente con la geometría de los pockets. En particular, en todos los barridos aparece una línea horizontal continua a lo largo de todo el rango angular, asociada al pocket  $\alpha$ , lo que indica una frecuencia prácticamente constante para cualquier ángulo de rotación y, por tanto, es una pocket con una geometría esférica. Comportamiento que fue descrito en la subsección 1.6.1 <sup>15</sup>.

Analizando las magnitudes de las frecuencias extremales detectadas, las más pequeñas asociadas al pocket  $\delta$  se observan en NbTe<sub>4</sub> y aparecen tanto cuando se incluye el acoplamiento espín-órbita como cuando no se incluye, particularmente en el rango de frecuencias más bajas del conjunto de resultados. El origen de estas frecuencias se relaciona directamente con la aparición de un hueco ubicado en el punto de alta simetría *M* en el pocket  $\delta$  de NbTe<sub>4</sub>, el cual le confiere al pocket una forma similar a la de un anillo. La existencia de este hueco representa la diferencia más notable entre las superficies de Fermi de NbTe<sub>4</sub> y TaTe<sub>4</sub>, ya que en TaTe<sub>4</sub> el pocket  $\delta$  no presenta ese hueco central y mantiene una morfología compacta, no anular. En NbTe<sub>4</sub>, el adelgazamiento del pocket alrededor del hueco reduce considerablemente el área transversal efectiva, dando lugar a las frecuencias más bajas observadas. La correspondencia entre esta característica geométrica y las frecuencias detectadas confirma que los resultados obtenidos son

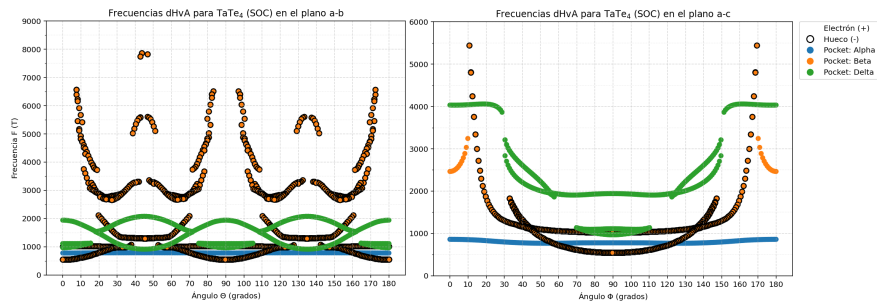
consistentes y que el algoritmo SKEAF reproduce con alta fidelidad las órbitas extremales reales de la superficie de Fermi.

En cuanto a la magnitud de las frecuencias obtenidas, se observa que el  $\text{TaTe}_4$  presenta valores más altos que el  $\text{NbTe}_4$  en ambos planos de rotación del campo magnético. En el plano  $ab$ , las frecuencias de  $\text{TaTe}_4$  alcanzan hasta aproximadamente 8500 T sin SOC y cerca de 7800 T con SOC, mientras que en el plano  $ac$  oscilan alrededor de 4970 T en ambos casos. En comparación,  $\text{NbTe}_4$  exhibe frecuencias más reducidas: en el plano  $ab$  los valores no superan los 7100 T y en el plano  $ac$  permanecen por debajo de 4300 T. Por otra parte, la inclusión del acoplamiento espín-órbita produce una ligera disminución general de las frecuencias en ambos compuestos, lo que sugiere una contracción moderada de las secciones extremales y indica que el SOC tiene una influencia notable sobre la superficie de Fermi.

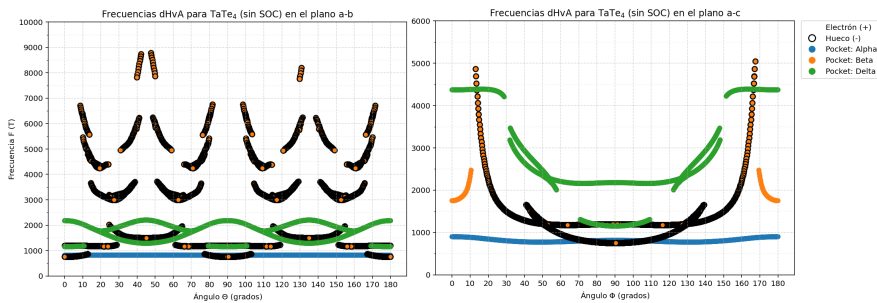
En conjunto, estos resultados confirman que la inclusión del acoplamiento espín-órbita provoca una ligera contracción de las áreas extremales y, en consecuencia, una reducción general de las frecuencias dHvA. La similitud entre los patrones angulares de  $\text{TaTe}_4$  y  $\text{NbTe}_4$  demuestra que ambos compuestos conservan la misma estructura electrónica fundamental, mientras que las pequeñas diferencias observadas se deben principalmente a la distinta intensidad del acoplamiento espín-órbita y a la geometría particular de los pockets en cada sistema.

Fig. 16. Frecuencias dHvA calculadas para  $\text{TaTe}_4$  y  $\text{NbTe}_4$ , con y sin el efecto SOC. Las figuras de la columna izquierda corresponden a los muestreos angulares realizados en el plano  $ab$ , siguiendo la trayectoria que parte del vector recíproco  $a$ , pasa por  $b$  y termina en  $-a$ . Por su parte, las figuras de la columna derecha corresponden a los muestreos realizados en el plano  $ac$ , siguiendo la trayectoria que parte de  $a$ , pasa por  $c$  y finaliza en  $-a$ .

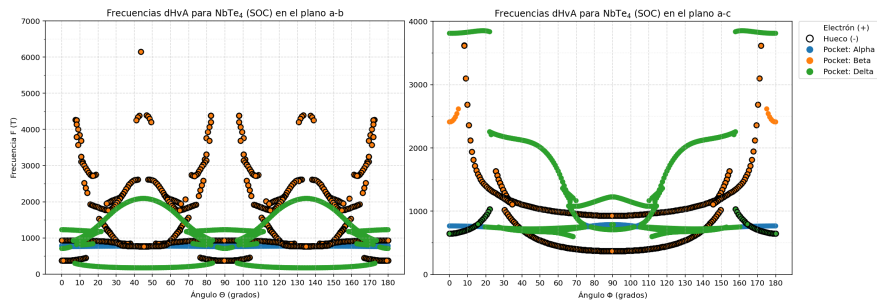
(a)  $\text{TaTe}_4$  con SOC.



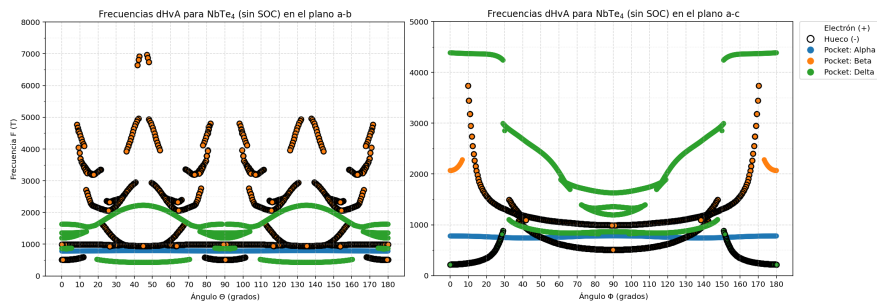
(b)  $\text{TaTe}_4$  sin SOC.



(c)  $\text{NbTe}_4$  con SOC.



(d)  $\text{NbTe}_4$  sin SOC.



Fuente: elaboración propia a partir de los resultados obtenidos con SKEAF.

### 3.3. COMPARACIÓN CON FRECUENCIAS EXPERIMENTALES REPORTADAS EN LA LITERATURA

Actualmente existen una gran cantidad de trabajos de información enfocados en realizar las mediciones experimentales de las frecuencias dHVa para el compuesto TaTe<sub>4</sub>. Aunque para el NbTe<sub>4</sub> la cantidad de trabajos publicados ha sido mucho menor a comparación de su compañero isoelectrónico.

Estas mediciones son hechas a muy bajas temperaturas del orden de  $2K$  hatas  $150K$ , por lo tanto, ambos compuestos están dentro de la temperatura donde poseen un estado de onda de densidad de carga. Este último produce un reordenamiento estructural, lo que produce cambio en la estructura electrónica y por tanto, cambios en la geometría de la superficie de Fermi que afecta directamente las mediciones de oscilaciones cuánticas. Sin embargo, aún en la fase de onda de densidad de carga el superficie de Fermi conserva características de las superfie de Fermi del estado base del compuesto, siendo esta última la superfice de Fermi recreada en este trabajo.

La primera fuente de datos experimentales se obtiene del trabajo Rojas Castillo<sup>36</sup>. El cual realiza mediciones del efecto Shubnikov-de Haas para el TaTe<sub>4</sub> en los rangos de temperaturas de  $1,3K$  hasta  $30K$ . De esta forma los datos obtenidos por él se presentan en las figuras 17. Ambas figuras muestran intensidad normalizada de la transformada rápida de Fourier (FFT) de las oscilaciones detectadas, donde el eje Y corresponde a la magnitud de las oscilaciones y le eje X el ángulo de incidencia deñ campo magnético.

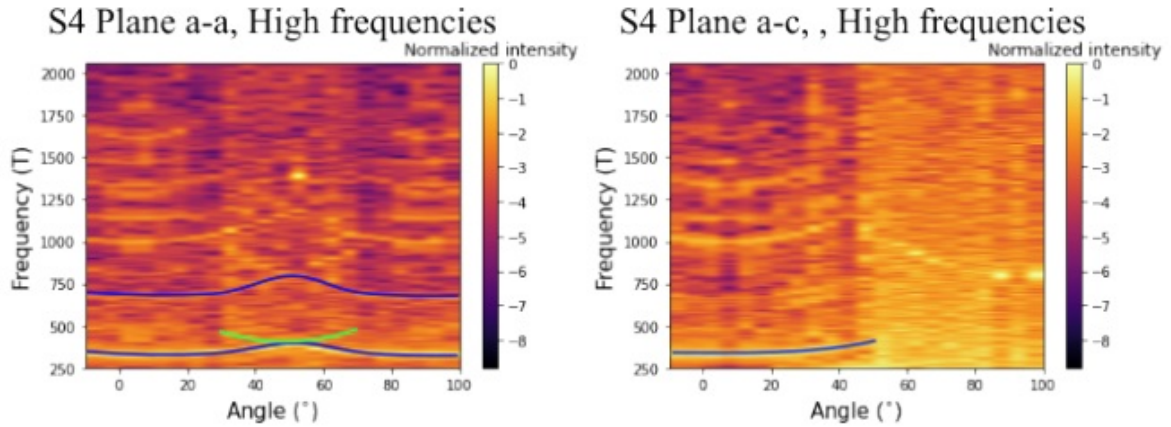
### 3.4. MASAS EFECTIVAS

En los cálculos computacionales realizados mediante SKEAF, la masa efectiva se obtiene a partir de la dispersión electrónica a lo largo de las órbitas extremas sobre la superficie de Fermi, según la ecuación 31. En primera instancia, estos resultados permiten identificar cuáles órbitas pueden

---

<sup>36</sup> Julián David Rojas Castillo. "Electronic and Topological Properties of TaTe<sub>4</sub> and Cu Doped TaTe<sub>4</sub>". Thesis. Bogotá, Colombia: University of Los Andes, 2023

Fig. 17. Mapas experimentales de oscilaciones Shubnikov–de Haas en TaTe<sub>4</sub> para la muestra S4, reportados por Rojas Castillo. Las figuras muestran la intensidad normalizada de la transformada rápida de Fourier (FFT) en función del ángulo de rotación del campo magnético y de la frecuencia de oscilación. El panel izquierdo corresponde a la rotación en el plano *a–a*, mientras que el panel derecho corresponde a la rotación en el plano *a–c*. En ambos casos se observan frecuencias altas asociadas principalmente al bolsillo  $\beta$ , representado mediante las líneas azules. En el plano *a–a* también se identifica una contribución adicional de menor frecuencia asociada al bolsillo  $\alpha$ , indicada por la línea verde.



Fuente: adaptado de <sup>36</sup>.

ser más susceptibles de detectarse experimentalmente mediante el efecto dHvA, ya que un aumento en la masa efectiva produce una mayor reducción de la amplitud de oscilación del momento magnético. Este comportamiento está contenido en el factor de reducción térmico de la ecuación de Lifshitz–Kosevich (véase la ecuación 22), por lo que las órbitas con menor masa efectiva son, en principio, las más favorables para su observación experimental <sup>16</sup>.

El mosaico de gráficas de la figura 18 presenta las masas efectivas de las órbitas extremales detectadas en los mapeos angulares realizados sobre los planos *ab* y *ac* para las frecuencias dHvA de todos los casos. En general, el pocket  $\alpha$ , para cualquier caso y cualquier dirección de muestreo, reúne varias de las ramas con menor masa efectiva. Siendo la principal la rama aquella con forma de recta horizontal de color azul que se presenta en cada una de las mediciones cerca al valor de  $0,5 m_e$ . En consecuencia, este pocket se perfila como el más favorable para una eventual detección experimental entre los tres pockets identificados.

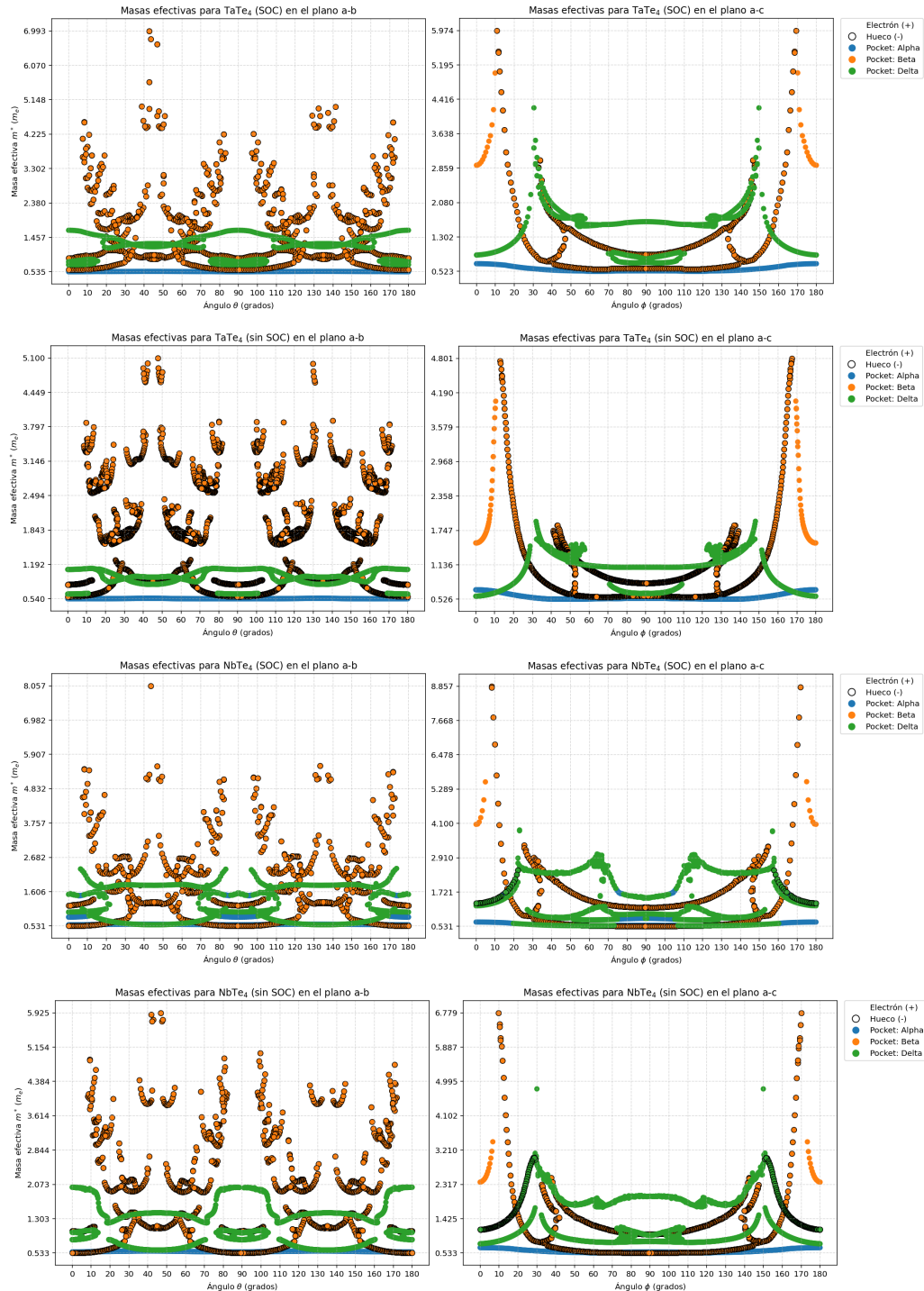
Por otro lado, el pocket  $\delta$  constituye el segundo pocket más favorable para su posible observación

experimental, ya que produce órbitas con masas efectivas por debajo de  $1,6m_e$  en cualquier plano de medición. En  $\text{TaTe}_4$ , tanto con SOC como sin SOC, las ramas más favorables de este pocket dentro del plano  $ab$  se localizan cuando el campo magnético se orienta en las direcciones  $a$  y  $b$ . En contraste, para  $\text{NbTe}_4$ , con y sin SOC, la región angular más favorable se ubica cuando el campo magnético apunta entre los vectores  $a$  y  $b$ . En el plano  $ac$ , el comportamiento también difiere entre compuestos. En  $\text{TaTe}_4$ , con y sin SOC, las ramas más favorables del pocket  $\delta$  aparecen cuando el campo magnético se orienta hacia la dirección  $c$ . Para  $\text{NbTe}_4$  con SOC, la mayor probabilidad de detección se concentra en orientaciones intermedias entre  $a$  y  $c$ , mientras que en ausencia de SOC las ramas más favorables se ubican nuevamente cerca de las direcciones  $a$  y  $c$ . Estas diferencias se deben al agujero central presente en los casos de  $\text{NbTe}_4$ , ya que este origina las masas efectivas más pequeñas para este pocket, como se observa en las figuras 22b y 23b, en las cuales se grafica la órbita responsable de la masa efectiva más pequeña, representada con una línea de color negro. Se puede observar que esta órbita cruza el agujero central del pocket  $\delta$ .

Finalmente, el pocket  $\beta$  presenta un comportamiento menos homogéneo en los cuatro casos analizados. En el plano  $ab$ , sus ramas más favorables se encuentran de manera sistemática cuando el campo magnético se orienta en las direcciones  $a$  y  $b$ , mientras que en el plano  $ac$  la mejor condición de observación se obtiene hacia la dirección  $c$ . En particular, la órbita asociada a la menor masa efectiva de este pocket corresponde a la orientación en la que el campo magnético apunta en la dirección  $b$ , la cual puede identificarse en las figuras 20a, 21a, 22a y 23a como una órbita localizada en uno de los lóbulos cercanos a la frontera de la zona de Brillouin.

Las tablas 2–5 presentan las masas efectivas mínimas y máximas ( $m_{\text{mín}}^c, m_{\text{máx}}^c$ ) y sus frecuencias asociadas para cada uno de los tres pockets ( $\alpha, \beta$  y  $\delta$ ) identificados en los compuestos  $\text{TaTe}_4$  y  $\text{NbTe}_4$ , con y sin acoplamiento espín–órbita (SOC).

Fig. 18. Masas efectivas calculadas para  $\text{TaTe}_4$  y  $\text{NbTe}_4$ , con y sin el efecto SOC. Las figuras de la columna izquierda corresponden a los muestreos angulares realizados en el plano  $ab$ , siguiendo la trayectoria que parte del vector recíproco  $b_1$ , pasa por  $b_2$  y termina en  $-b_1$ . Por su parte, las figuras de la columna derecha corresponden a los muestreos realizados en el plano  $ac$ , siguiendo la trayectoria que parte de  $b_1$ , pasa por  $b_3$  y finaliza en  $-b_1$ .



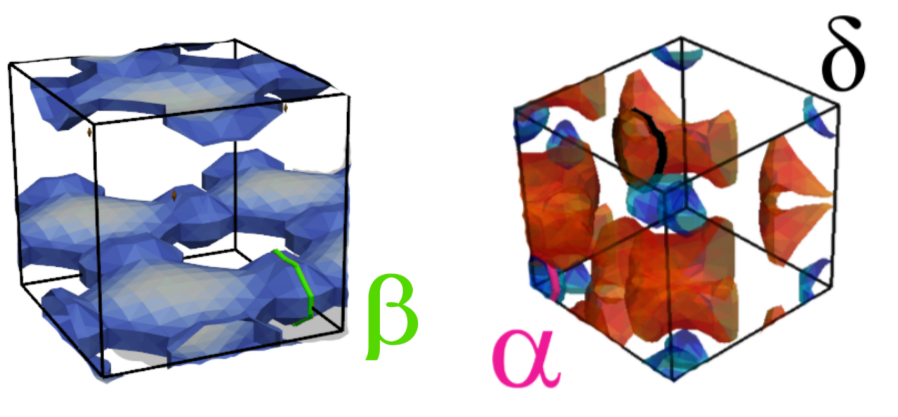
Fuente: elaboración propia a partir de los resultados obtenidos con SKEAF.

Tabla 2. Masas ciclotrón efectivas mínimas y máximas ( $m_{\text{mín}}^c$  y  $m_{\text{máx}}^c$ ), junto con las frecuencias dHVA asociadas ( $F$ ), para los bolsillos  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\delta$  en  $\text{TaTe}_4$ , calculadas con SKEAF incluyendo acoplamiento espín-órbita (SOC).

Pockets	$m_{\text{mín}}^c [m_e]$	$F [\text{T}]$	$m_{\text{máx}}^c [m_e]$	$F [\text{T}]$
$\alpha$	0.535	777.0	0.545	786.3
$\beta$	0.587	1014.6	6.993	7741.4
$\delta$	0.724	1109.6	1.647	1941.6

Fuente: elaboración propia a partir de los resultados obtenidos con SKEAF.

Fig. 19. Órbitas extremales correspondientes a las menores masas ciclotrón efectivas  $m^*$  de los distintos pockets de la superficie de Fermi en  $\text{TaTe}_4$ , incluyendo acoplamiento espín-órbita.



(a) Órbita extremal asociada a la menor masa ciclotrón efectiva  $m^*$  del bolsillo  $\beta$  (verde).

(b) Órbitas extremales asociadas a las menores masas ciclotrón efectivas  $m^*$  de los bolsillos  $\alpha$  (rosa) y  $\delta$  (negro).

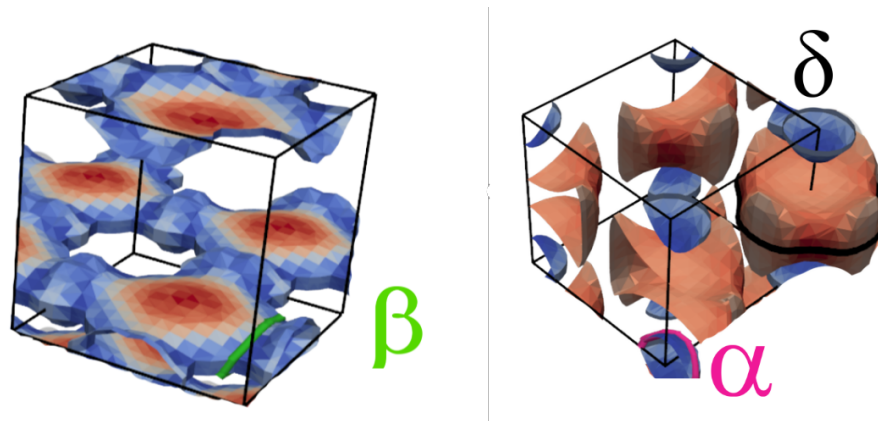
Fuente: elaboración propia a partir de los resultados obtenidos con SKEAF.

Tabla 3. Masas ciclotrón efectivas mínimas y máximas ( $m_{\text{mín}}^c$  y  $m_{\text{máx}}^c$ ), junto con las frecuencias dHVA asociadas ( $F$ ), para los bolsillos  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\delta$  en TaTe<sub>4</sub>, calculadas con SKEAF sin incluir acoplamiento espín-órbita.

Pockets	$m_{\text{mín}}^c$ [ $m_e$ ]	$F$ [T]	$m_{\text{máx}}^c$ [ $m_e$ ]	$F$ [T]
$\alpha$	0.526	772.6	0.577	823.7
$\beta$	0.565	1181.6	5.100	8782.2
$\delta$	0.578	4370.9	1.909	3186.9

Fuente: elaboración propia a partir de los resultados obtenidos con SKEAF.

Fig. 20. Órbitas extremales correspondientes a las menores masas ciclotrón efectivas  $m^*$  de los distintos bolsillos de la superficie de Fermi en TaTe<sub>4</sub>, sin incluir acoplamiento espín-órbita.



(a) Órbita extremal asociada a la menor masa ciclotrón efectiva  $m^*$  del bolsillo  $\beta$  (verde).

(b) Órbitas extremales asociadas a las menores masas ciclotrón efectivas  $m^*$  de los bolsillos  $\alpha$  (rosa) y  $\delta$  (negro).

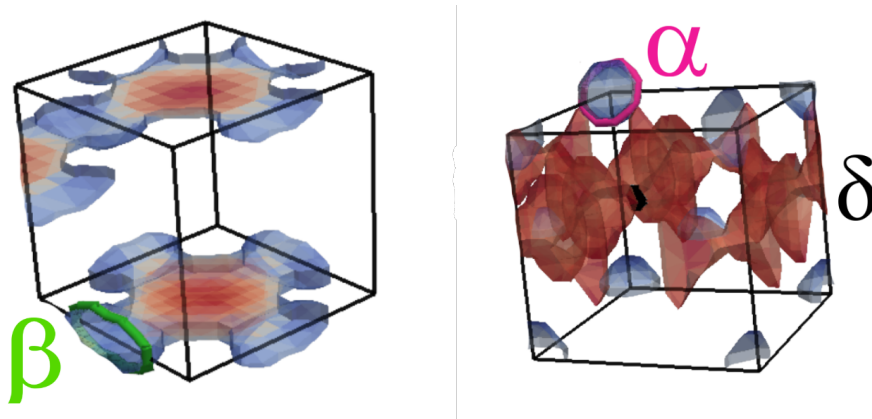
Fuente: elaboración propia a partir de los resultados obtenidos con SKEAF.

Tabla 4. Masas ciclotrón efectivas mínimas y máximas ( $m_{\text{mín}}^c$  y  $m_{\text{máx}}^c$ ), junto con las frecuencias dHVA asociadas ( $F$ ), para los bolsillos  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\delta$  en  $\text{NbTe}_4$ , calculadas con SKEAF incluyendo acoplamiento espín-órbita (SOC).

Pockets	$m_{\text{mín}}^c [m_e]$	$F [\text{T}]$	$m_{\text{máx}}^c [m_e]$	$F [\text{T}]$
$\alpha$	0.547	734.1	0.681	766.4
$\beta$	0.531	927.6	8.857	3621.5
$\delta$	0.569	171.7	3.871	2210.0

Fuente: elaboración propia a partir de los resultados obtenidos con SKEAF.

Fig. 21. Órbitas extremales correspondientes a las menores masas ciclotrón efectivas  $m^*$  de los distintos bolsillos de la superficie de Fermi en  $\text{NbTe}_4$ , incluyendo acoplamiento espín-órbita.



(a) Órbita extremal asociada a la menor masa ciclotrón efectiva  $m^*$  del bolsillo  $\beta$  (verde).

(b) Órbitas extremales asociadas a las menores masas ciclotrón efectivas  $m^*$  de los bolsillos  $\alpha$  (rosa) y  $\delta$  (negro).

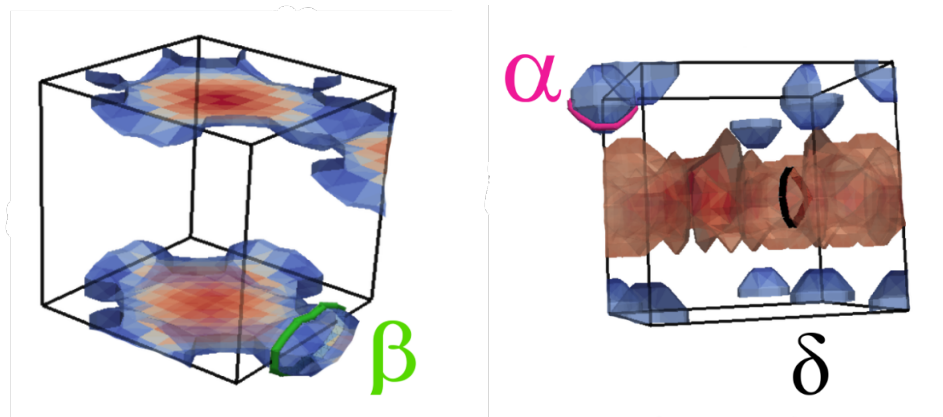
Fuente: elaboración propia a partir de los resultados obtenidos con SKEAF.

Tabla 5. Masas ciclotrón efectivas mínimas y máximas ( $m_{\text{mín}}^c$  y  $m_{\text{máx}}^c$ ), junto con las frecuencias dHVA asociadas ( $F$ ), para los bolsillos  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\delta$  en  $\text{NbTe}_4$ , calculadas con SKEAF sin incluir acoplamiento espín-órbita.

Pockets	$m_{\text{mín}}^c [m_e]$	$F [\text{T}]$	$m_{\text{máx}}^c [m_e]$	$F [\text{T}]$
$\alpha$	0.534	756.5	0.673	779.6
$\beta$	0.533	992.5	6.779	3740.7
$\delta$	0.598	425.1	4.800	2852.1

Fuente: elaboración propia a partir de los resultados obtenidos con SKEAF.

Fig. 22. Órbitas extremales correspondientes a las menores masas ciclotrón efectivas  $m^*$  de los distintos bolsillos de la superficie de Fermi en  $\text{NbTe}_4$ , sin incluir acoplamiento espín-órbita.



(a) Órbita extremal asociada a la menor masa ciclotrón efectiva  $m^*$  del bolsillo  $\beta$  (verde).

(b) Órbitas extremales asociadas a las menores masas ciclotrón efectivas  $m^*$  de los bolsillos  $\alpha$  (rosa) y  $\delta$  (negro).

Fuente: elaboración propia a partir de los resultados obtenidos con SKEAF.

### 3.5. TEOREMA DE LUTTINGER

En la Tabla 6 se presentan los resultados obtenidos a partir de la aplicación del teorema de Luttinger para los compuestos TaTe<sub>4</sub> y NbTe<sub>4</sub>, tanto con como sin acoplamiento espín-órbita (SOC). La tabla organiza la información en varias columnas: en primer lugar, se indica el compuesto y el caso de estudio considerado (con SOC o sin SOC); posteriormente, se especifica el pocket analizado ( $\alpha$ ,  $\beta$  o  $\delta$ ) junto con el tipo de portador que posee (electrón o hueco) y si es un pocket abierto o cerrado. Finalmente, se reportan el volumen del pocket,  $V_{\text{pocket}}$ , calculado a partir de la superficie de Fermi, y la densidad de portadores correspondiente  $n_p$ , obtenida mediante la relación establecida por el teorema de Luttinger 44 entre el volumen ocupado en el espacio  $k$  y la densidad de partículas en el espacio real.

**3.5.1. Balance electrón-hueco y tipo de conductor** A partir de las densidades por pocket se define el balance neto de portadores como

$$n_e = \sum_{\text{pockets e}^-} n_p, \quad (46)$$

$$n_h = \sum_{\text{pockets h}} n_p, \quad (47)$$

$$n_{\text{net}} = n_e - n_h. \quad (48)$$

El signo de  $n_{\text{net}}$  permite inferir el tipo de conducción dominante:  $n_{\text{net}} > 0$  indica un metal tipo-n y  $n_{\text{net}} < 0$  indica un metal tipo-p; si  $n_{\text{net}} \approx 0$  el sistema es aproximadamente compensado.

Para TaTe<sub>4</sub> con SOC se obtiene  $n_{\text{net}} = -2,4063 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ , lo que indica un comportamiento tipo-p dominado por huecos; este resultado es consistente con la dominancia en magnitud del pocket  $\beta$ , que fija el carácter del balance. En contraste, NbTe<sub>4</sub> con SOC presenta  $n_{\text{net}} \approx 0$ , lo que sugiere un escenario cercano a compensación electrón-hueco, aun cuando el pocket  $\beta$  aporta la mayor densidad individual. En ausencia de SOC, TaTe<sub>4</sub> muestra un balance levemente tipo-n con  $n_{\text{net}} = +2,0625 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , correspondiente a un sistema casi compensado pero con ligera

predominancia electrónica; en este caso, el pocket dominante es  $\delta$ , cuya contribución determina el carácter final del sistema. Por su parte, NbTe<sub>4</sub> sin SOC es marcadamente tipo-n, con  $n_{\text{net}} = +4,8337 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ , resultado coherente con la dominancia del pocket  $\delta$ .

Tabla 6. Resultados del teorema de Luttinger para TaTe<sub>4</sub> y NbTe<sub>4</sub>, con y sin acoplamiento espín-órbita (SOC). Para cada caso se reporta el tipo de portadores del pocket (electrones o huecos), su condición geométrica (abierto si la superficie se conecta consigo misma a través de los bordes de la primera zona de Brillouin por periodicidad, o cerrado si forma una superficie cerrada contenida dentro de ella), el volumen de Luttinger  $V_{\text{pocket}}$  asociado a cada pocket y la densidad de portadores correspondiente. Debido a la inclusión de SOC, la contribución de espín no se introduce como duplicación independiente; en su lugar, la densidad de cada pocket se obtuvo sumando las contribuciones de las bandas que lo componen. En ausencia de SOC y sin polarización magnética, se consideró la duplicación asociada a las dos orientaciones de espín, de modo que cada volumen de pocket contribuye con dos estados de espín a la densidad de portadores.

Compuesto / Caso	Pockets	Portador / geometría	$V_{\text{pocket}}$ ( $\text{\AA}^{-3}$ )	$n$ (portadores/ $\text{cm}^3$ )
TaTe <sub>4</sub> con SOC	$\alpha$	electrón - Cerrado	$5,1903 \times 10^{-03}$	$4,1848 \times 10^{19}$
	$\beta$	hueco - Abierto	$7,9151 \times 10^{-02}$	$6,3819 \times 10^{20}$
	$\delta$	electrón - Cerrado	$4,4117 \times 10^{-02}$	$3,5571 \times 10^{20}$
NbTe <sub>4</sub> con SOC	$\alpha$	electrón - Cerrado	$5,2130 \times 10^{-03}$	$4,2032 \times 10^{19}$
	$\beta$	hueco - Cerrado	$1,3033 \times 10^{-02}$	$1,0508 \times 10^{20}$
	$\delta$	electrón - Cerrado	$7,8195 \times 10^{-03}$	$6,3048 \times 10^{19}$
TaTe <sub>4</sub> sin SOC	$\alpha$	electrón - Cerrado	$8,1875 \times 10^{-03}$	$6,6015 \times 10^{19}$
	$\beta$	hueco - Abierto	$8,4433 \times 10^{-02}$	$6,8077 \times 10^{20}$
	$\delta$	electrón - Cerrado	$7,8805 \times 10^{-02}$	$6,3540 \times 10^{20}$
NbTe <sub>4</sub> sin SOC	$\alpha$	electrón - Cerrado	$5,2130 \times 10^{-03}$	$4,2032 \times 10^{19}$
	$\beta$	hueco - Cerrado	$1,3033 \times 10^{-02}$	$1,0508 \times 10^{20}$
	$\delta$	electrón - Cerrado	$6,7769 \times 10^{-02}$	$5,4642 \times 10^{20}$

Fuente: elaboración propia a partir del análisis de volúmenes de Luttinger realizado en este trabajo.

## 4. CONCLUSIONES

A partir de cálculos de primeros principios se calcularon las superficies de Fermi de  $\text{TaTe}_4$  y  $\text{NbTe}_4$ , identificándose tres pockets en cada compuesto. Aunque se trata de materiales distintos, en este trabajo se adoptó la misma nomenclatura  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\delta$  para ambos sistemas. Al comparar las superficies de Fermi, los pockets muestran geometrías similares en forma, tamaño y ubicación en el espacio recíproco, en concordancia con la relación isoelectrónica e isoestructural entre  $\text{TaTe}_4$  y  $\text{NbTe}_4$ . Mediante la estimación computacional de oscilaciones cuánticas del efecto de de Haas–van Alphen se contrastó las frecuencias de oscilación tipo dHvA y, además, se identificaron las frecuencias asociadas a cada pocket a lo largo del muestreo angular, las cuales constituyen una referencia directa para futuras comparaciones con mediciones experimentales de oscilaciones cuánticas.

Los resultados obtenidos respaldan que ambos compuestos se comportan como semimetales multibanda, ya que las densidades de portadores calculadas mediante el teorema de Luttinger se ubican en el rango  $\sim 10^{19}$ – $10^{20} \text{ cm}^{-3}$ , característico de este tipo de sistemas. Adicionalmente, el pocket  $\beta$  es generado por una banda distinta a la que origina los pockets  $\alpha$  y  $\delta$ , mientras que estos dos últimos provienen de una misma banda; en consecuencia, el transporte en ambos compuestos es intrínsecamente multibanda.

Un resultado central muestra que el acoplamiento espín–órbita (SOC) no actúa como una corrección menor, sino que modifica de manera significativa la superficie de Fermi. En particular, al incluir SOC el pocket con mayor contribución de portadores cambia de  $\delta$  a  $\beta$ . Asimismo, en  $\text{NbTe}_4$  el SOC altera de forma marcada la geometría del pocket  $\delta$  y reduce su volumen, comportamiento que no se observa con la misma intensidad en  $\alpha$  y  $\beta$ . Esta reconstrucción tiene implicaciones directas sobre el carácter global del sistema y sobre su respuesta de magnetotransporte, ya que modifica el balance neto entre electrones y huecos. En particular,  $\text{TaTe}_4$  con SOC presenta un balance neto tipo- $p$ , mientras que sin SOC se aproxima a un escenario casi compensado con ligera

predominancia electrónica.

El hecho de que el pocket  $\beta$  concentre la mayor densidad de portadores en los casos considerados más cercanos a la situación física real, es decir, aquellos en los que se incluye SOC, constituye un indicio adicional de que esta hoja podría desempeñar un papel importante en los mecanismos de anidamiento de la superficie de Fermi que favorecen la formación de ondas de densidad de carga. En este sentido, y en conjunto con la presencia de regiones geoméricamente planas en la superficie de Fermi, se motiva como trabajo futuro un análisis explícito de las condiciones de anidamiento.

En consecuencia, a partir de las masas efectivas ciclotron calculadas es posible anticipar qué pockets tienen mayor probabilidad de ser observados en futuras mediciones del efecto de Haas–van Alphen en estos compuestos: aquellos asociados a masas más ligeras tenderán a presentar amplitudes más robustas, mientras que los vinculados a masas grandes serán menos favorables y requerirán temperaturas más bajas y campos magnéticos más altos para su detección. Finalmente, se resalta la obtención de las dependencias angulares de las frecuencias dHvA para NbTe<sub>4</sub>: de acuerdo con el estado del arte disponible al momento de este trabajo, no se encontraron reportes previos, ni teóricos ni experimentales, de oscilaciones dHvA en este compuesto, por lo que estos resultados aportan una guía cuantitativa para futuras campañas experimentales y su interpretación.

## BIBLIOGRAFÍA

- Ashcroft, Neil W y ND Mermin. "Solid state". En: *Physics (New York: Holt, Rinehart and Winston) Appendix C 1* (1976).
- Banjare, Manoj Kumar y Dinesh Tandon. "Explicit modeling of corrosion inhibition". En: *Computational Modelling and Simulations for Designing of Corrosion Inhibitors*. Elsevier, 2023, págs. 227-240.
- Blöchl, Peter E. "Projector augmented-wave method". En: *Physical review B* 50.24 (1994), pág. 17953.
- Blundell, Stephen. *Magnetism in condensed matter*. OUP Oxford, 2001.
- Boswell, FW, A Prodan y JK Brandon. "Charge-density waves in the quasi-one-dimensional compounds NbTe<sub>4</sub> and TaTe<sub>4</sub>". En: *Journal of Physics C: Solid State Physics* 16.6 (1983), pág. 1067.
- Chakraborty, Tapash. *Encyclopedia of condensed matter physics*. Elsevier Science & Technology, 2023.
- Gao, Yuxia et al. "Anisotropic large magnetoresistance in TaTe<sub>4</sub> single crystals". En: *Journal of Applied Physics* 122 (13 oct. de 2017). DOI: 10.1063/1.5005907.
- Giustino, Feliciano. *Materials modelling using density functional theory: properties and predictions*. Oxford University Press, 2014.
- Griffiths, D.J. *Introduction to Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, 2017.

- Gruner, G. "The dynamics of charge-density waves". En: *Rev. Mod. Phys.* 60 (4 1988), págs. 1129-1181. DOI: 10.1103/RevModPhys.60.1129.
- Gruner, George. *Density waves in solids*. CRC press, 2018.
- Herath, Uthpala et al. "PyProcar: A Python library for electronic structure pre/post-processing". En: *Computer Physics Communications* 251 (2020), pág. 107080. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2019.107080>.
- Hohenberg, Pierre y Walter Kohn. "Inhomogeneous electron gas". En: *Physical review* 136.3B (1964), B864.
- Kittel, Charles y Paul McEuen. *Introduction to solid state physics*. John Wiley & Sons, 2018.
- Kohn, Walter y Lu Jeu Sham. "Self-consistent equations including exchange and correlation effects". En: *Physical review* 140.4A (1965), A1133.
- Kokalj, Anton. "XCrySDen—a new program for displaying crystalline structures and electron densities". En: *Journal of Molecular Graphics and Modelling* 17.3 (1999), págs. 176-179. DOI: [https://doi.org/10.1016/S1093-3263\(99\)00028-5](https://doi.org/10.1016/S1093-3263(99)00028-5).
- Kresse, G. y J. Furthmüller. "Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set". En: *Computational Materials Science* 6.1 (1996), págs. 15-50. DOI: 10.1016/0927-0256(96)00008-0.
- "Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set". En: *Phys. Rev. B* 54 (1996), págs. 11169-11186. DOI: 10.1103/PhysRevB.54.11169.

- Kresse, G. y J. Hafner. "Ab initio molecular dynamics for liquid metals". En: *Phys. Rev. B* 47 (1993), págs. 558-561. DOI: 10.1103/PhysRevB.47.558.
- Kresse, Georg y Jurgen Hafner. "Norm-conserving and ultrasoft pseudopotentials for first-row and transition elements". En: *Journal of Physics: Condensed Matter* 6.40 (1994), pág. 8245.
- Kresse, Georg y Daniel Joubert. "From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method". En: *Physical review b* 59.3 (1999), pág. 1758.
- Lang, Logan et al. "Expanding PyProcar for new features, maintainability, and reliability". En: *Computer Physics Communications* 297 (2024), pág. 109063. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2023.109063>.
- Liang, Tian et al. "Ultrahigh mobility and giant magnetoresistance in the Dirac semimetal Cd<sub>3</sub>As<sub>2</sub>". En: *Nature materials* 14.3 (2015), págs. 280-284.
- Mar, Arthur, Stephane Jobic y James A Ibers. "Metal-metal vs tellurium-tellurium bonding in WTe<sub>2</sub> and its ternary variants TaIrTe<sub>4</sub> and NbIrTe<sub>4</sub>". En: *Journal of the American Chemical Society* 114.23 (1992), págs. 8963-8971.
- Perdew, John P et al. "Atoms, molecules, solids, and surfaces: Applications of the generalized gradient approximation for exchange and correlation". En: *Physical review B* 46.11 (1992), pág. 6671.
- Rojas Castillo, Julián David. "Electronic and Topological Properties of TaTe<sub>4</sub> and Cu Doped TaTe<sub>4</sub>". Thesis. Bogotá, Colombia: University of Los Andes, 2023.

- Rourke, P. M.C. y S. R. Julian. "Numerical extraction of de Haas-van Alphen frequencies from calculated band energies". En: *Computer Physics Communications* 183 (2 feb. de 2012), págs. 324-332. DOI: 10.1016/j.cpc.2011.10.015.
- Selte, K. et al. "On the crystal structure of NbTe<sub>4</sub>". En: *Acta Chem. Scand.* 18 (1964), págs. 690-696. DOI: 10.3891/acta.chem.scand.18-0690.
- Shein, IR y AL Ivanovskii. "Electronic band structure, Fermi surface, and elastic properties of new 4.2 K superconductor SrPtAs from first-principles calculations". En: *arXiv preprint arXiv:1105.2386* (2011).
- Stanford Advanced Materials. *NbTe<sub>4</sub> crystal*. Accessed: 2025-04-03. n.d.
- "The Fermi surfaces of copper, silver and gold. I. The de Haas-Van alphen effect". En: *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences* 255 (1052 nov. de 1962), págs. 85-133. DOI: 10.1098/rsta.1962.0011.
- Xu, R. Z. et al. "Orbital-selective charge-density wave in TaTe<sub>4</sub>". En: *npj Quantum Materials* 8 (1 dic. de 2023). DOI: 10.1038/s41535-023-00573-8.
- Yuan, Yifang et al. "Pressure-Induced Superconductivity in Topological Semimetal Candidate TaTe<sub>4</sub>". En: *Advanced Electronic Materials* 6 (3 mar. de 2020). DOI: 10.1002/aelm.201901260.
- Zhang, Xi et al. "Eightfold fermionic excitation in a charge density wave compound". En: *Physical Review B* 102 (3 jul. de 2020). DOI: 10.1103/PhysRevB.102.035125.
- Zhao, Weiyao y Xiaolin Wang. "Berry phase in quantum oscillations of topological materials". En: *Advances in Physics: X* 7.1 (2022), pág. 2064230.