

Topologiske isolatorer

Niels Jakob S e Loft

12. september 2018

1 Krystalstruktur og Blochs teorem

Faste stoffer er karakteriseret ved, at atomerne er ordnede i en krystal med en periodisk gitterstruktur. Dette betyder, at en partikel (fx en elektron), der befinder sig i et faststof, oplever et periodisk potentiale, $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{a})$, hvor \mathbf{a} er en vektor, der angiver periodiciteten af krystallen. Den mindste del af systemet, der udg r det gentagende gitterstruktur, kaldes for enhedscellen. Kendskab til systemet i enhedscellen (potentiale, b lgefunktioner, energiniveauer osv.) beskriver hele systemet. N r man Fourier-transformerer potentialet eller b lgefunktionerne til k -rum (k er b lgetallet, s  t nk p  k -rummet som impulsrum), er det intuitivt klart, at man igen f r et gentagende m nster. For at undg  gentagelser, n jes man derfor med at Fourier-transformere enhedscellen, hvilket resulterer i den del af k -rum, der kaldes for Brillouin-zonen (eller f rste Brillouin-zone, ofte forkortet BZ).

Blochs teorem siger, at b lgefunktionerne i et periodisk potential med periode a kan skrives p  formen

$$\psi_k(x) = e^{ikx} u_k(x) , \quad (1)$$

hvor $u_k(x + a) = u_k(x)$ er en periodisk funktion med samme periode som potentialet og k er b lgetallet. Et  kvivalent udsagn er, at b lgefunktionen (op til en fasefaktor) er periodisk med samme periode (se ligning (1.8) i [1]).

- L s 1.1 i [1] om Blochs teorem og udled formel (1).

En anden effekt af et periodisk krystalgitter afspejler sig i energispektret. I en simpel 1D model kun med nabovekselvirkning er grundtilstandsenergien givet ved

$$E(k) = E_0 + 2\gamma \cos ka , \quad (2)$$

hvor $E_0 > 0$ og $\gamma < 0$ er konstanter, der afh nger af materialet.

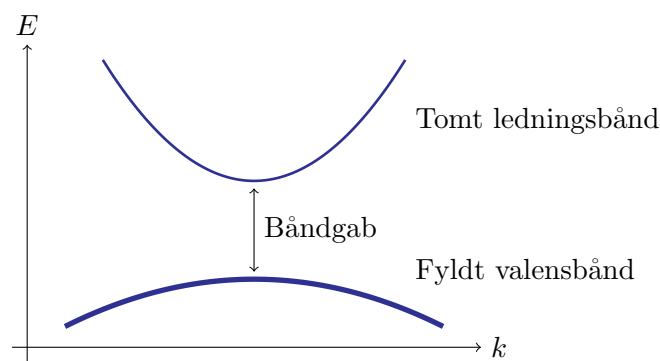
- L s 1.4.1 i [1] om t tbindingsmodellen og udled formel (2).
- Hvordan generaliserer ligning (2) til 2D og 3D, hvis krystalgitteret er periodisk med samme periode a i alle retninger?

- Sammenlign bølgefunktionen (1) og energispekret (2) med tilfældene for en fri partikel. Hvilken effekt har tilstedeværelsen af det periodiske krystalpotentiale på bølgefunktionen og energispekret?

Det fulde energispektrum for et rigtigt materiale indeholder naturligvis mere end blot ét energibånd. Generelt er energibåndstrukturen uhyre kompliceret, hvilket I også kan finde massevis af eksempler på i [1]. En ikke uvæsentlig del af faststof går ud på at beregne, analysere og måle båndstrukturer.

2 Isolatorer og topologiske isolatorer

Elektronerne i et materiale vil i nultemperaturgrænsen $T = 0$ besætte de nederste energitilstande. Fordi elektroner er fermioner, er der kun plads til én elektron i hver tilstand, så elektronerne besætter således gradvist tilstandene i energibåndene med stigende energi. Hvis et energibånd ikke er fuldt besat, kan elektronerne bevæge sig mellem tilstandene i båndet og lede en elektrisk strøm. Derimod kan elektronerne i fyldte bånd ikke lede en strøm. Hvis de mest energirige elektroner akkurat udfylder et bånd, og der er et (forholdsvis stort) spring op til det næste bånd, vil elektroner ikke springe op i det tomme bånd, hvor de kan være med til at lede en strøm i materialet. Af denne årsag kaldes materialer med sådanne båndgap for isolatorer, se figur 1.



Figur 1: En isolator er karakteriseret ved et båndgap mellem det højeste fyldte og nederste ikke-fyldte energibånd.

En særlig type af isolatorer kaldes topologiske isolatorer, fordi de besidder særlige egenskaber, der kan beskrives vha. den matematiske disciplin topologi. Topologi handler bl.a. om at karakterisere objekter vha. tal, der er uændrede under glatte deformationer af objektet. I denne forstand er en kaffekop og en doughnut ens, men forskellig fra en fodbold – her er det antallet af huller i objektet, der er det invariante topologiske tal, der er uændret under glatte deformationer. I en topologisk isolator kan energibåndene karakteriseres vha.

lignende topologisk invariante tal. Systemets topologiske egenskaber, såsom eksistensen af kvantemekaniske tilstande, der lever på kanten af systemet, er umådeligt robuste, fordi netop deformationer af systemet kun kan ændre det topologisk invariante tal i ganske særlige tilfælde. Denne robusthed overfor støj er en af årsagerne til, at topologiske materialer er blevet spået en fremtid indefor diverse kvanteteknologier. Opdagelsen af topologiske materialer og stoffers overgang mellem forskellige topologiske faser gav i år (2016) Thouless, Haldane og Kosterlitz Nobelprisen i fysik.

3 Chern-isolatoren

Vi skal nu beskæftige os med en specifik model for en topologisk isolator, der dog belyser nogle meget centrale og generelle pointer. Betragt følgende 2-niveau Hamilton-operator:

$$H(\mathbf{k}) = \mathbf{h}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad \text{hvor} \quad \mathbf{h}(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} \sin k_x \\ \sin k_y \\ r + \cos k_x + \cos k_y \end{bmatrix} \quad (3)$$

Her afhænger Hamilton-operatoren af 2D-bølgevektoren $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$, og $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ er Paulis sigma-matricer. De to energiniveauer er givet ved

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{\sin^2 k_x + \sin^2 k_y + (r + \cos k_x + \cos k_y)^2}. \quad (4)$$

Denne model kan bruges til at beskrive en isolator, hvor de to energiniveauer er hhv. valensbåndet og ledningsbåndet fra figur 1 (teknisk set er energibåndene nu 2D-overflader).

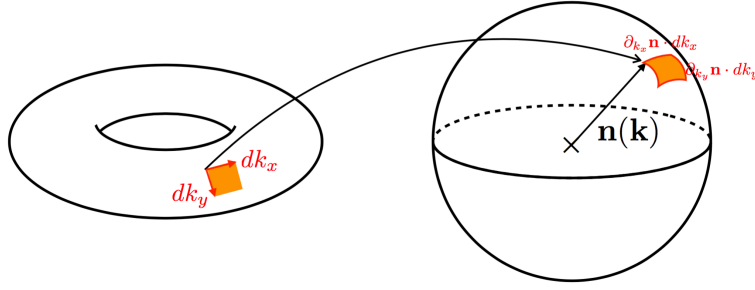
- Vis, at Hamilton-operatoren (3) er hermitisk.
- Vis, at energiniveauerne er givet ved (4).
- Argumentér for, at Brillouin-zonen (BZ) er 2D-overfladen givet ved $0 \leq k_x, k_y < 2\pi$.
- Er det muligt at lukke båndgabet i isolatoren? For hvilke værdier af r er det muligt, og hvor i BZ sker det?
- Plot de to energibånd (energioverflader) over BZ for forskellige valg af parameteren r . Bekræft, at båndgabet lukkes for de værdier af r , som I fandt ovenfor.

Vi kan knytte et topologisk invariant tal, kaldet Chern-tallet, til hvert energibånd. Chern-tallet er et heltal, der afhænger af værdien af parameteren r . Hvis Chern-tallet ændrer sig, må det derfor springe i skridt af hele tal,

også selvom r ændres kontinuert. Chern-tallet for grundtilstandsbåndet er givet ved:

$$C_- = \frac{1}{4\pi} \int_{\text{BZ}} d^2k \mathbf{n} \cdot (\partial_{k_x} \mathbf{n} \times \partial_{k_y} \mathbf{n}), \quad (5)$$

hvor $\mathbf{n} = \mathbf{h}/|\mathbf{h}|$ er enhedsvektoren, og dermed angiver et punkt på en sfære med radius 1 (kaldet Bloch-sfæren). Integralet er over hele BZ, som kan afbildes som en torus (doughnut) med omkreds 2π i begge retninger, idet k_x og $k_x + 2\pi$ pr. periodicitet er fysisk ækvivalente punkter (tilsvarende for k_y). Integralet over hele BZ er altså et dobbeltintegralt over k_x og k_y , der begge integreres fra 0 til 2π . Chern-tallet for det øverste energibånd er $C_+ = -C_-$.



Figur 2: Chern-tallet for det nederste energibånd C_- er det antal gange $\mathbf{n}(\mathbf{k})$ overstryger Bloch-sfæren (regnet med fortegn) idet der integreres over BZ.

- Argumentér for, at $d^2k (\partial_{k_x} \mathbf{n} \times \partial_{k_y} \mathbf{n}) = \partial_{k_x} \mathbf{n} dk_x \times \partial_{k_y} \mathbf{n} dk_y$ er en infinitesimal arealvektor vinkelret på Bloch-sfæren.
- Argumentér for, at $d^2k \mathbf{n} \cdot (\partial_{k_x} \mathbf{n} \times \partial_{k_y} \mathbf{n}) = \mathbf{n} \cdot (\partial_{k_x} \mathbf{n} dk_x \times \partial_{k_y} \mathbf{n} dk_y)$ er et infinitesimalt areal på Bloch-sfæren (regnet med fortegn).
- Konkluder nu, at integralet $\int_{\text{BZ}} d^2k \mathbf{n} \cdot (\partial_{k_x} \mathbf{n} \times \partial_{k_y} \mathbf{n})$ er det areal (regnet med fortegn), som $\mathbf{n}(\mathbf{k})$ overstryger idet der integreres over BZ. Da Bloch-sfærens overfladeareal er 4π , er C_- altså den andel af sfæren, som $\mathbf{n}(\mathbf{k})$ overstryger i løbet af integrationen over BZ.

At C_- endda må være et heltal vil vi vise i det følgende. Vi vil derfor overveje, hvad der sker, når man integrerer over BZ. Formelt skrives det som et dobbeltintegralt:

$$C_- = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} dk_x \int_0^{2\pi} dk_y \mathbf{n} \cdot (\partial_{k_x} \mathbf{n} \times \partial_{k_y} \mathbf{n}). \quad (6)$$

- Hold k_x fast og betragt det inderste (linje-)integralt over k_y i ligning (6). Argumentér for, at $\mathbf{n}(\mathbf{k})$ overstryger en orienteret lukket kurve $\mathcal{P}(k_x)$ på Bloch-sfæren idet k_y varieres fra 0 til 2π .

- Såfremt $\mathbf{n}(\mathbf{k})$ er veldefineret, vil $\mathcal{P}(k_x)$ ændres kontinuert som k_x varieres. Argumentér for, at vi starter og slutter med den samme kurve idet k_x varieres fra 0 til 2π .
- Antag, at $\mathcal{P}(k_x)$ ikke ændrer orientering idet k_x varieres fra 0 til 2π . Argumentér for, at da vil $C_- = 0$.
- Hvad skal $\mathcal{P}(k_x)$ opfylde for at få $C_- \neq 0$? Hvordan kan dette lade sig gøre geometrisk?

Med det specifikke $\mathbf{h}(\mathbf{k})$ givet i ligning (3) kan C_- antage værdierne $0, \pm 1$ afhængig af værdien af r . Et Chern-tal på 0 fås ved at $\mathbf{n}(\mathbf{k})$ først overstryger et område på Bloch-sfæren, og derefter overstryger det samme område med modsat fortegn, hvorimod et Chern-tal på ± 1 fås når $\mathbf{n}(\mathbf{k})$ overstryger hele sfæren én gang. Vi vil nu undersøge, hvordan C_- afhænger af r .

- Eftersom C_- altid er et heltal, kan værdien af C_- ikke ændres ved at ændre $\mathbf{n}(\mathbf{k})$ på kontinuert måde. Kun når $\mathbf{n}(\mathbf{k})$ går hen og bliver diskontinuert, kan C_- ændres sig (i spring af heltal). For hvilke værdier af r kan det ske, og i hvilke punkter i BZ? Hvad sker der rent fysisk i disse tilfælde? Argumenter for, at C_- ikke er veldefineret for disse værdier af r .
- Angiv de fire intervaller for r , hvor C_- kan have forskellig værdi.
- Hvad er C_- når $r < -2$ og $r > 2$?

Vi vil i det følgende fokusere på området omkring $r = -2$ og beregne C_- når $-2 < r < 0$. Analysen vil bygge på en beregning af bidraget til C_- fra området omkring $\mathbf{k} = (0, 0)$ for r omkring -2 . Definér $m = r + 2$, dvs. vi er interesserede i C_- omkring $m = 0$.

- Vis, at når $\mathbf{k} \approx (0, 0)$, er

$$\mathbf{h}(\mathbf{k}) \approx \begin{bmatrix} k_x \\ k_y \\ m \end{bmatrix} .$$

Med andre ord er Hamilton-operatoren

$$H(\mathbf{k}) \approx k_x \sigma_x + k_y \sigma_y + m \sigma_z . \quad (7)$$

- Vis, at når $\mathbf{k} \approx (0, 0)$ er

$$\mathbf{n} \cdot (\partial_{k_x} \mathbf{n} \times \partial_{k_y} \mathbf{n}) \approx \frac{m}{(k^2 + m^2)^{3/2}} , \quad (8)$$

hvor $k^2 = k_x^2 + k_y^2$.

- Beregn hvor meget området omkring $\mathbf{k} = (0, 0)$ bidrager til Chern-tallet C_- . Dette gøres ved at indsætte udtrykket (8) i (5), men i stedet for at integrere over hele BZ, skal I kun integrere i omegnen af $\mathbf{k} = (0, 0)$. Dette kan fx gøres ved at integrere over en cirkelskive med centrum i $\mathbf{k} = (0, 0)$ og radius R , og dernæst lade $R \rightarrow 0$. Vis, at bidraget til C_- er $-1/2$ når $m \rightarrow 0^-$, og $1/2$ når $m \rightarrow 0^+$. (Pas på med rækkefølgen, I tager grænseværdierne for m og R i – de kommuterer nemlig ikke!)
- Argumentér for, at den del af BZ, som I ikke integrerede over, bidrager med $1/2$ til C_- når $m \rightarrow 0^-$. Da integranden i (5) er veldefineret i denne del af BZ også når $m = 0$, giver denne del ligeledes bidraget $1/2$ når $m \rightarrow 0^+$. Hvad er C_- når $-2 < r < 0$?

I har nu beregnet C_- når $r < 0$. Vha. lignende argumenter kan man beregne C_- når $r > 0$, om man finder, at Chern-tallet er en ulige funktion af r , dvs. at $C_-(r) = -C_-(-r)$.

- Plot Chern-tallet for hvert energibånd, $C_{\pm}(r)$, som funktion af r .

Ved at variere parameteren r kan man altså ændre Chern-tallene på energiniveauerne. Når dette sker taler man om en topologisk faseovergang.

4 Generelt 2-niveau-system

Hvis I har tid, kan I prøve at se på et generelt 2-niveau-system med en \mathbf{k} -afhængig Hamilton-operator, hvor Chern-isolatoren altså er et specialtilfælde. En generel Hamilton-operator kan skrives som

$$H(\mathbf{k}) = \mathbf{h}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} , \quad (9)$$

hvor $\mathbf{h}(\mathbf{k})$ er en general 3D-vektor med \mathbf{k} -afhængige indgange.

- Vis, at denne Hamilton-operator beskriver alle 2-niveau-systemer.
- Hvad er energiniveauerne?
- Chern-tallet er givet som i forrige afsnit. Gennemgå argumenterne for, at Chern-tallet er et heltal og overbevis jer om, at dette også gælder for et generelt 2-niveau-system.
- Vis, at Chern-tallet kun kan ændres når båndgabet lukkes (dvs. når energiniveauerne bliver udartede).

Litteratur

- [1] G. Grosso & G. P. Parravicini: *Solid State Physics*, 2nd ed., Academic Press (2014)
- [2] G. M. Bruun: *Lecture Notes for Solid State Physics II* (2016)