

Topologiske isolatorer

Niels Jakob Sørensen Loft & Kristian Knakkegaard Nielsen

23. oktober 2018

1 Krystalstruktur og Blochs sætning

Faste stoffer er karakteriseret ved, at atomerne er ordnede i et krystal med en periodisk gitterstruktur. Dette betyder, at en partikel (fx en elektron), der befinder sig i et faststof, oplever et periodisk potential, $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{a})$, hvor \mathbf{a} er en vektor, der angiver periodiciteten af krystallen. Den mindste del af systemet, der udgør det gentagende gitterstruktur, kaldes for enhedscellen. Kendskab til systemet i enhedscellen (potential, bølgefunktioner, energiniveauer osv.) beskriver hele systemet.

Blochs sætning siger, at bølgefunktionerne i et periodisk potential med periode a kan skrives på 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 bølgetallet. Ovenstående er formuleret i 1 dimension, men tilsvarende gælder i 2 og 3 dimensioner. Et ækvivalent udsagn er, at bølgefunktionen (op til en fasefaktor) er periodisk med samme periode (se ligning (1.8) i [2]).

- Læs 1.1 i [2] om Blochs sætning 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

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

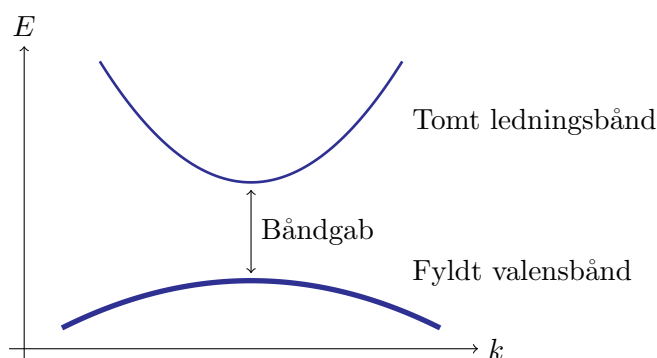
hvor $E_0 > 0$ og $\gamma < 0$ er konstanter, der afhænger af materialet.

- Læs 1.4.1 i [2] om tætbindingsmodellen og udled formel (2).
- Sammenlign bølgefunktionen (1) og energispektret (2) med tilfældene for en fri partikel. Hvilken effekt har tilstedeværelsen af det periodiske krystalpotential på bølgefunktionen og energispektret?

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 [2]. 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 for temperatur $T = 0$ 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 båndgab 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 inden for diverse kvanteteknologier. Opdagelsen af topologiske materialer og stoffers overgang mellem forskellige topologiske faser gav i 2016 Thouless, Haldane og Kosterlitz Nobelprisen i fysik.

3 SSH-modellen

I dette projekt vil vi i detalje analysere den såkaldte Su-Schrieffer-Heeger (SSH) model. Den blev oprindeligt brugt til at beskrive elektrisk ledning i polymerer af acetylen [4]. Først senere fandt man ud af, at denne model er et af de simpleste eksempler på en topologisk isolator. I 2017 lykkedes det i Jacqueline Blochs laboratorium at fremstille modellen eksperimentielt ved hjælp af koblede halvledere [5]. Dette vil vi ikke gå i detalje med, men det vil være muligt at vende tilbage til i form af en diskussion af mulige eksperimentelle synteser.

3.1 Model, skematisk afbildning og Hamilton-operatoren

SSH-modellen beskriver fermioner, der hopper rundt i et 1D gitter, bestående af enhedsceller med to skelnelige gitterpunkter: et A -punkt og et B -punkt. Afstanden mellem enhedscellerne definerer gitterkonstanten a . Dette er vist i Fig. 2. Ligesom i tætbindingssmodellen er der kun hop mellem A - og B -punkter, som er naboer. Matricelementet for at hoppe mellem A og B inden for enhedscellen er $t - \delta t$. For at hoppe uden for enhedscellen er det $t + \delta t$. δt beskriver altså hvor forskellige de to matricelementer er.

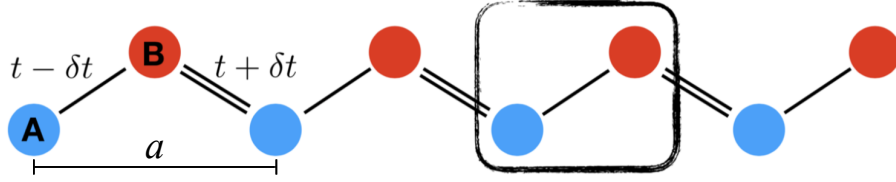
En fuldstændig basis der beskriver dette system, består således af tilstandene $\{|n, A\rangle, |n, B\rangle\}$ for $1 \leq n \leq N$. Her er $|n, A\rangle = |n\rangle |A\rangle$ en produkttilstand, der beskriver en partikel i enhedscelle n i gitterpunkt A . Hvis I er utrygge ved Dirac-notation, så læs eventuelt i [1], s. 10-32.

Vi antager, at de er ortonormale: $\langle n, I | n', I' \rangle = \delta_{n,n'} \delta_{I,I'}$. Hamilton-operatoren kan da skrives i denne basis som

$$H = (t - \delta t) \sum_{n=1}^N (|n, A\rangle \langle n, B| + |n, B\rangle \langle n, A|) + (t + \delta t) \sum_{n=1}^N (|n+1, A\rangle \langle n, B| + |n, B\rangle \langle n+1, A|), \quad (3)$$

med $t > 0$. Vi antager desuden (uden tab af generalitet), at $|\delta t| \leq t$. Der er N enhedsceller og vi bruger cykliske randbetingelser. Det sidste betyder, at enhedscelle n og $n + N$ er sammenfaldende. Fysisk antager vi, at kæden er formet som en ring.

- Vis, at Hamilton-operatoren (3) er hermisk.



Figur 2: SSH-modellen består af en kæde af f.eks. atomer med to skelnelige gitterpunkter, A og B . Enhedscellen består således af ét A -punkt og ét B -punkt som vist. Enhedscellerne er adskilt af gitterkonstanten a . Der er to typer af matricelementer: mellem A og B inden for enhedscellen: $t - \delta t$, og mellem to forskellige enhedsceller: $t + \delta t$. Alle andre matricelementer er 0. Herved fremkommer et alternerende mønster indikeret med enkelt- og dobbeltstreger.

- Vis, at Hamilton-operatoren har følgende matricelementer:

$$\begin{aligned}\langle n, B | H | n, A \rangle &= \langle n, A | H | n, B \rangle = t - \delta t, \\ \langle n, B | H | n + 1, A \rangle &= \langle n + 1, A | H | n, B \rangle = t + \delta t,\end{aligned}$$

for $n = 1, 2, \dots, N$. Overvej at alle andre matricelementer er 0.

3.2 Diagonalisering via Fourier-transformation

I dette afsnit diagonaliserer vi Hamilton-operatoren. Dvs. vi finder egentilstandene og egenenergiene. Først leder vi efter tilstande $|k\rangle$, der opfylder ligningerne

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikna} |k\rangle, \quad (4)$$

for $1 \leq n \leq N$. Her er k indtil videre blot et reelt tal med samme enhed som et bølgetal (da ka skal være enhedsløs). Ovenstående er ikke rigtig en definition af de nye tilstande, men snarere en ligning vi *ønsker*, de skal opfylde. Vi skal lidt senere se, hvorfor vi gør det. For nu vil vi gerne lære noget mere om, hvad de disse $|k\rangle$ -tilstande skal opfylde og finde et eksplicit udtryk for dem.

- Da vi arbejder med cykliske randbetingelser er $|n + N\rangle = |n\rangle$. Vis da, at $e^{ikNa} = 1$. Overvej, at dette betyder at k kan tage de følgende værdier

$$k = l \frac{2\pi}{Na}, \quad (5)$$

hvor $l = 0, 1, -1, 2, -2, \dots$ er et heltal. Vi ved dog stadig ikke, hvor mange led der er i k -summen.

- Vis, at

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N e^{-ikna} |n\rangle = \sum_{k'} \left[\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{i(k'-k)na} \right] |k'\rangle, \quad (6)$$

- Find wikipedia siden for en *geometrisk sum*. Læs om denne og brug det til at vise, at

$$\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{i(k'-k)na} = \delta_{k,k'}, \quad (7)$$

hvor højresiden er Kroneckers delta. Dvs. denne sum giver et 1-tal, hvis $k' = k$ og ellers giver den 0. Kan I argumentere mere intuitivt for dette? Vi har da, at

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N e^{-ikna} |n\rangle \quad (8)$$

Overvej, at ligning (4) og (8) er Fourier-transformationer!

- Brug ligning (8) til at vise, at $|k + \frac{2\pi}{a}\rangle = |k\rangle$.

Det sidste punkt viser, at tilstandene kun er veldefineret op til et multiplum af $2\pi/a$. For at have entydige tilstande arbejder vi derfor kun med k i intervallet $(-\pi/a, \pi/a]$. Dette er første Brillouinzone (eller blot Brillouin-zonen)! Med andre ord kan l i ligning (5) kun tage værdierne $l = -N/2+1, -N/2+2, \dots, N/2$. Nu har vi styr på, hvad tilstandene $|k\rangle$ er matematisk. De er defineret ved ligning (8) og (5) med k i intervallet $(-\pi/a, \pi/a]$!

Da k fremkommer ved en Fourier-transformation, da $\hbar k$ har samme enhed som impuls og da $\hbar k$ i flere sammenhænge optræder på samme måde som en impuls kaldes $\hbar k$ for *krystalimpulsen*. Vi vender nu tilbage til, hvorfor vi har indført disse nye tilstande. Ved at gange tilstandene $|A\rangle$ og $|B\rangle$ på $|n\rangle$ i ligning (4) får vi

$$|n, A\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikna} |k, A\rangle, \quad |n, B\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikna} |k, B\rangle. \quad (9)$$

- Indsæt udtrykkene i ligning (9) for $|n, A\rangle$ og $|n, B\rangle$ i Hamilton-operatoren (3). Brug igen ligning (7) og vis, at

$$H = \sum_k \left[\left(t - \delta t + (t + \delta t)e^{+ika} \right) |k, A\rangle \langle k, B| + \left(t - \delta t + (t + \delta t)e^{-ika} \right) |k, B\rangle \langle k, A| \right]. \quad (10)$$

Fordelen ved dette udtryk for H er, at led til forskellige værdier af krystalimpulsen er uafhængige. Derfor kan vi finde egentilstande for hvert k ! Lad os nu kigge på matrixrepræsentationen \mathcal{H}_k for H for en bestemt krystalimpuls $\hbar k$

$$\mathcal{H}_k = \begin{bmatrix} \langle k, A | H | k, A \rangle & \langle k, A | H | k, B \rangle \\ \langle k, B | H | k, A \rangle & \langle k, B | H | k, B \rangle \end{bmatrix}. \quad (11)$$

Dette er altså i den ordnede basis $\{|k, A\rangle, |k, B\rangle\}$.

- Vis, at

$$\mathcal{H}_k = \begin{bmatrix} 0 & t - \delta t + (t + \delta t)e^{-ika} \\ t - \delta t + (t + \delta t)e^{ika} & 0 \end{bmatrix}. \quad (12)$$

- Skriv \mathcal{H}_k på formen $\mathcal{H}_k = h_{x,k}\sigma_x + h_{y,k}\sigma_y + h_{z,k}\sigma_z$. Her er $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ Pauli-matricer. h_x, h_y, h_z definerer en vektor. Vis, at

$$\mathbf{h}_k = \begin{bmatrix} h_{x,k} \\ h_{y,k} \\ h_{z,k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t - \delta t + (t + \delta t)\cos(ka) \\ (t + \delta t)\sin(ka) \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (13)$$

- Vinklen mellem $h_{x,k}$ og $h_{y,k}$ er azimuthalvinklen ϕ_k . Denne er altså givet ved de implicitte formler

$$\cos(\phi_k) = \frac{h_{x,k}}{|\mathbf{h}_k|}, \quad \sin(\phi_k) = \frac{h_{y,k}}{|\mathbf{h}_k|}. \quad (14)$$

Denne viser sig at gemme på den topologiske invariant, som vi skal se på i næste afsnit. Vær derfor sikker på, at I forstår hvad denne vinkel/fase er. Lav eventuelt en tegning med h_x på x -aksen, h_y på y -aksen, tegn vektoren \mathbf{h} og vinklen ϕ .

- Vis, at

$$\mathcal{H}_k = |\mathbf{h}_k| \begin{bmatrix} 0 & e^{-i\phi_k} \\ e^{+i\phi_k} & 0 \end{bmatrix}. \quad (15)$$

Vi kan nu finde egentilstande og egen-energier ved at finde egenvektorer og egenværdier til \mathcal{H}_k . Det viser sig, at der for hvert k er 1 grundtilstand og 1 exciteret tilstand beskrevet ved egenvektorerne $\mathbf{u}_{\pm,k}$ med tilhørende egenværdier $E_{\pm,k}$

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{-,k} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -e^{i\phi_k} \end{bmatrix}, & E_{-,k} &= -|\mathbf{h}_k|. \\ \mathbf{u}_{+,k} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ +e^{i\phi_k} \end{bmatrix}, & E_{+,k} &= +|\mathbf{h}_k|. \end{aligned}$$

- Tjek, at $\mathcal{H}_k \mathbf{u}_{\pm,k} = E_{\pm,k} \mathbf{u}_{\pm,k}$.
- $E_{\pm,k} = \pm |\mathbf{h}_{\pm,k}|$ er altså egenenergiene for hvert k . Båndgabet for SSH-modellen er altså $\Delta E = 2 \min_k |\mathbf{h}_k|$. Tegn disse energier som funktion af k (i første Brillouinzone) for forskellige værdier af δt og marker ΔE . Prøv f.eks. $\delta t = -t/2, 0, t/2$.
- Er der en værdi af δt , hvor $\Delta E = 0$?

Vha. egenvektorer til \mathcal{H}_k kan vi nu konstruere de endelige egentilstande, $|\psi_{\pm}, k\rangle$. Explicit med $\mathbf{u}_{-,k} = (u_{1-,k}, u_{2-,k})$ og tilsvarende for $+$ er

$$\begin{aligned} |\psi_{-,k}\rangle &= u_{1-,k}^* |k, A\rangle + u_{2-,k}^* |k, B\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|k, A\rangle - e^{-i\phi_k} |k, B\rangle \right], \\ |\psi_{+,k}\rangle &= u_{1+,k}^* |k, A\rangle + u_{2+,k}^* |k, B\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|k, A\rangle + e^{-i\phi_k} |k, B\rangle \right]. \end{aligned} \quad (16)$$

Vi har altså fundet egentilstandene til Hamilton-operatoren. Den nuværende analyse fokuserer på *det indre* af systemet. Dette kaldes "bulk" på engelsk. I afsnittet om kanttilstanden skal vi se, at hvis vi åbner ringen, så kæden har en ende og dermed en kant, kan der snige sig en ekstra tilstand ind, som er eksponentielt lokaliseret på denne kant.

- Omskriv Hamilton-operatoren til

$$H = \sum_k |\mathbf{h}_k| \left[e^{i\phi_k} |k, A\rangle \langle k, B| + e^{-i\phi_k} |k, B\rangle \langle k, A| \right]. \quad (17)$$

- Ved at bruge ligning (16) og (17) tjek da, at $H |\psi_{\pm}, k\rangle = E_{\pm,k} |\psi_{\pm}, k\rangle$.

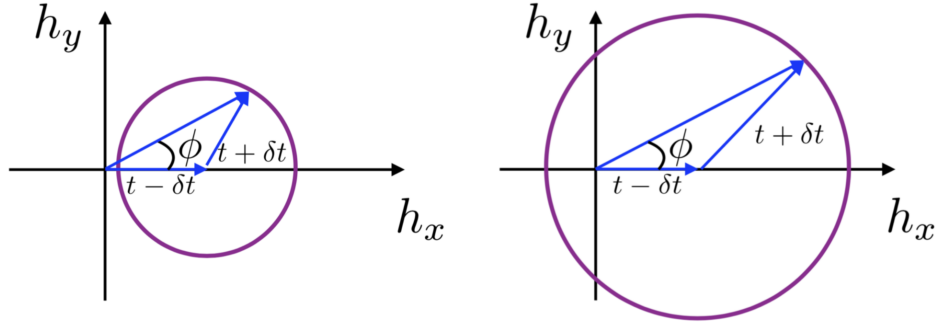
Ekstra opgave:

- Ved at bruge at $\langle m|n, A\rangle = \delta_{n,m} |A\rangle$ vis, at

$$\langle m|\psi_{\pm,k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2N}} e^{-ikma} \left(|A\rangle \pm e^{-i\phi_k} |B\rangle \right). \quad (18)$$

Dette giver en forbindelse til Blochs sætning. Kan I se hvordan? *Hint*: I ovenstående er $x = ma$ x -koordinaten. Har det samme form som $\psi_k(x) = e^{-ikx} u_k(x)$?

Vi er nu klar til at definere og studere den topologiske invariant.



Figur 3: Skitse af h_x, h_y og vinklen ϕ_k for to værdier af δt . Til venstre er $\delta t < 0$. Til højre er $\delta t > 0$.

3.3 Den topologiske invariant

Den topologiske invariant for SSH-modellen er det såkaldte omdrejningstal \mathcal{W} (på engelsk: *winding number*). Dette er defineret ud fra fasen ϕ_k vi stødte på i foregående afsnit

$$\mathcal{W} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{d\phi_k}{dk} dk. \quad (19)$$

I denne formel betragter vi krystalimpulsen som en kontinuert variabel. Overvej at dette er ok, når $N \gg 1$. I figur 3 vises, hvordan ϕ_k ændrer sig som funktion af k for to værdier af δt . I næste afsnit viser vi, hvorfor dette er en invariant. For nu bruger vi blot ovenstående som en definition og beregner den som funktion af δt .

- Lav en tegning som i figur 3 af vektoren \mathbf{h}_k .
- Hvad er \mathcal{W} på de to tegninger? Er den forskellig for $\delta t < 0$ og $\delta t > 0$?

De to ovenstående punkter giver en grafisk løsning af integralet i (19), der giver

$$\mathcal{W} = \begin{cases} 0, & \delta t < 0. \\ 1, & \delta t > 0. \end{cases} \quad (20)$$

Dette viser, at \mathcal{W} ændrer sig diskontinuert i $\delta t = 0$.

- Hvad er båndgabet ΔE for $\delta t = 0$?

Ekstra opgaver:

- Ved at bruge $\tan(\phi_k) = h_{y,k}/h_{x,k}$ vis da, at

$$\frac{d\phi}{dk} = a \frac{(t + \delta t)^2 + (t - \delta t)(t + \delta t) \cos(ka)}{(t + \delta t)^2 + (t - \delta t)^2 + 2(t - \delta t)(t + \delta t) \cos(ka)}. \quad (21)$$

Hint: skriv først $\phi_k = \arctan(h_{y,k}/h_{x,k}) + C$, hvor C er en konstant. Differentier dette udtryk og reducer. Dette er lidt svært, så hæng i!

- Vi kan bruge dette udtryk til at beregne \mathcal{W} eksplicit. Plot $d\phi/dk$ for $\delta t = -t, -t/2, 0, t/2, t$.
- Indsæt $\delta t = -t, 0, t$ i $d\phi/dk$. Hvad er \mathcal{W} i disse tre tilfælde? Passer det med figur 3?

3.4 Symmetri og topologi

I dette afsnit definerer vi, hvad en topologisk faseovergang er. Vi kigger derefter på, hvordan omdrejningstallet fra foregående afsnit er tilknyttet dette. Det er et ret svært afsnit, hvor I skal lære en del nye begreber, så vær tålmodige.

Når vand går fra is til væske, kalder vi det en faseovergang. Den flydende fase, væsken, er translations-invariant. Det betyder, at hvis jeg står et sted i væsken og flytter mig (eller *translaterer* mig), ser det ud på samme måde som før. Væsken er altså invariant under min translation.

I den faste fase, isen, er det ganske anderledes. Is er et krystal. Specifikt er det ikke ens overalt. Hvis f.eks. jeg starter ved et gitterpunkt, sidder der et atom. Men går jeg halvvejs til det næste atom, er der slet ikke noget. Translations-invariansen er brudt! Det er et eksempel på et såkaldt spontant symmetribrud, som ofte sker, når man køler noget ned. Det beskriver vand og mange andre materials faser, samt meget eksotiske faser som et Bose-Einstein kondensat og superledende materialer. I alle disse tilfælde bliver en symmetri brudt ved et bestemt punkt. I dette punkt er den såkaldte *frie energi* ens for de to faser. Dette lærer I mere om i Statistisk Fysik! For vand brydes translationsinvariansen ved $T = 0^\circ\text{C}$, når det går fra flydende til fast form.

Topologiske faseovergange er anderledes! Der er stadig en energiforskel, som er 0 lige ved faseovergangen. I dette tilfælde er det båndgabet ΔE . Men i modsætning til ovenstående er en bestemt fase ikke defineret ved, om den har en vis symmetri, som en anden fase ikke har. Tværtimod sker der slet ikke et symmetribrud i en topologisk faseovergang. Idéen er altså, at når vi ændrer en bestemt variabel lukker båndgabet ΔE sig ved et bestemt punkt. Det fører til følgende definition af topologiske faser.

Topologisk faser er tilstande, der har et båndgab, som ikke bryder nogen symmetrier spontant, og som ikke kan konverteres til hinanden uden at lukke båndgab.

For SSH-modellen er δt vores variabel, og båndgabets størrelse lukker sig i $\delta t = 0$. I dette punkt så vi også, at omdrejningstallet \mathcal{W} ændrede sig fra 0 til 1. Vi skal nu se, at hvis systemet overholder en bestemt symmetri, *skal* båndgabets størrelse lukke sig, hvis omdrejningstallet ændrer sig fra 0 til 1. Derfor er systemet i to forskellige topologiske faser for $\mathcal{W} = 0$ og $\mathcal{W} = 1$. Et sådant tal der er konstant i en bestemt topologisk fase, og som kun ændrer sig, hvis båndgabets størrelse lukker sig, kaldes en *topologisk invariant*.

Denne type af topologiske faser, som er beskyttede af en symmetri, kaldes *symmetri-beskyttede topologiske faser*. Der findes endnu mere eksotiske systemer og tilhørende tilstande, hvis topologiske tilstande slet ikke afhænger af nogen symmetrier. Dem vil vi dog ikke komme nærmere ind på. Symmetrien vi hentyder til i denne sammenhæng, ser således ud

$$S = P_A - P_B = \sum_{n=1}^N [|n, A\rangle \langle n, A| - |n, B\rangle \langle n, B|]. \quad (22)$$

Her er $P_A = \sum_{n=1}^N |n, A\rangle \langle n, A|$ en projektion på A -gitterpunkter, tilsvarende for P_B .

- Vis, at $P_A H P_A = 0 = P_B H P_B$.
- Overvej, at $P_A + P_B = \mathbb{I}$. Altså er summen af projektionerne identitetsoperatoren.
- Brug ovenstående til at vise, at $S H S = -H$. *Hint:* Skriv $S = P_A - P_B$ og skriv $S H S$ ud i fire led. Brug derefter punkt 1 og 2 ovenfor.

En symmetri på denne form, hvor $S H S = -H$, kaldes for en subgittersymmetri (på engelsk: sublattice symmetry). Deraf bogstavet S .

- Vis, at $S^2 = \mathbb{I}$. *Hint:* Brug, at identiteten kan skrives som $\mathbb{I} = \sum_{n=1}^N [|n, A\rangle \langle n, A| + |n, B\rangle \langle n, B|]$.
- Vis, at $S H = -H S$.
- Antag, at $|\psi_E\rangle$ er en egentilstand med energi E : $H |\psi_E\rangle = E |\psi_E\rangle$. Vis, at $H(S |\psi_E\rangle) = -E(S |\psi_E\rangle)$. Altså er $S |\psi_E\rangle$ en egentilstand med energi $-E$. Dette viser, at der til enhver tilstand med energi E findes en tilhørende tilstand med energi $-E$. Med andre ord er energispektret symmetrisk omkring 0! Dette er formentlig grunden til, at S kaldes for en symmetri.

- Vis eksplicit for de fundne egentilstande tidligere, at $S|\psi_{+,k}\rangle = |\psi_{-,k}\rangle$. Dvs. de fundne egentilstande er forbundet af S .

Vi ønsker nu at studere, hvilke restriktioner på H det giver at antage, at S er en symmetri. Til dette formål antager vi nu, at H har en noget mere generel form, hvor \mathcal{H}_k skrives som

$$\mathcal{H}_k = h_{x,k}\sigma_x + h_{y,k}\sigma_y + h_{z,k}\sigma_z. \quad (23)$$

Man kan vise, at enhver 2×2 matrix af interesse kan skrives på denne form. Man kan herved også vise, at \mathcal{H}_k , og den tilhørende Hamilton H , beskriver en generel gitter-periodisk Hamilton i 1D med to energibånd.

- Fourier-transformér S til k -rum:

$$S = \sum_k [|k, A\rangle \langle k, A| - |k, B\rangle \langle k, B|]. \quad (24)$$

- Beregn matrix-repræsentationen \mathcal{S} af S i basen $\{|k, A\rangle, |k, B\rangle\}$. *Resultat:* $S = \sigma_z$, den tredje Pauli-matrix.
- Omskriv S og H til følgende

$$\begin{aligned} S &= \sum_k \begin{bmatrix} |k, A\rangle & |k, B\rangle \end{bmatrix} \mathcal{S} \begin{bmatrix} \langle k, A| \\ \langle k, B| \end{bmatrix}, \\ H &= \sum_k \begin{bmatrix} |k, A\rangle & |k, B\rangle \end{bmatrix} \mathcal{H}_k \begin{bmatrix} \langle k, A| \\ \langle k, B| \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (25)$$

hvilket altså eksplicit indeholder $\mathcal{S}, \mathcal{H}_k$. Her skal $\begin{bmatrix} |k, A\rangle & |k, B\rangle \end{bmatrix}$ forstås som en rækkevektor indeholdende tilstandene $|k, A\rangle, |k, B\rangle$.

- Vis, at $SH = -HS \Leftrightarrow \mathcal{S}\mathcal{H}_k = -\mathcal{H}_k\mathcal{S}$. Dette er ikke så nemt. Spørg endelig, hvis det er for svært.

Sidste punkt viser, at vi blot kan analysere operatorerne i termer af matrixrepræsentationerne for hvert k .

- Vis, at $\mathcal{S}\mathcal{H}_k = -\mathcal{H}_k\mathcal{S} \Leftrightarrow h_{z,k} = 0$ for alle k . Det betyder, at vektoren \mathbf{h} altid ligger i (h_x, h_y) -planen.
- Overvej, at så længe systemet overholder symmetrien S , og så længe båndgabet er åbent ($\Delta E \neq 0$), så er omdrejningstallet \mathcal{W} et heltal.
- Overvej yderligere, at omdrejningstallet kun kan ændre sig, hvis $\Delta E = 0$ krydses.
- Overvej, at hvis systemet ikke overholder S , dvs. hvis $h_{z,k} \neq 0$, så kan vi godt ændre omdrejningstallet fra 0 til 1, *uden* at båndgabet lukker!

De sidste tre punkter ovenfor viser, at omdrejningstallet er en topologisk invariant, *hvis* systemet overholder symmetrien S .

3.5 Kanttilstanden

I dette afsnit kigger vi på, hvilken fysisk konsekvens det har, at systemet kan være i to forskellige topologiske faser. Vi konstruerer i denne sammenhæng eksplicit en ekstra tilstand for $\delta t > 0$, som er eksponentielt lokaliseret på kanten af systemet. Dette forbinder den topologiske fase med tilstedeværelsen af en kanttilstand.

For at analysere opførslen af materialet nær en kant, åbner vi kæden, og lader den have en ende mod venstre. Således kan Hamilton-operatoren skrives

$$H = (t - \delta t) \sum_{n=1}^{\infty} (|n, A\rangle \langle n, B| + |n, B\rangle \langle n, A|) + (t + \delta t) \sum_{n=1}^{\infty} (|n+1, A\rangle \langle n, B| + |n, B\rangle \langle n+1, A|). \quad (26)$$

Der er altså ikke nogen enhedsceller til venstre for $n = 1$. Lad nu

$$|\psi\rangle = \sum_{m=1}^{\infty} [a_m |m, A\rangle + b_m |m, B\rangle]. \quad (27)$$

Dette er en generel ansatz for den ønskede kanttilstand.

- Vi ønsker at tilføje en tilstand til det allerede fundne energispektrum med $E_{\pm,k}$ og samtidig stadig overholde symmetrien S . Overvej, at hvis vi skal finde en enkelt tilstand, så må den have energi $E = 0$. *Hint*: energispektret er symmetrisk omkring 0!
- Vi antager altså, $H|\psi\rangle = 0$. Brug dette til at vise, at

$$0 = (t - \delta t) \sum_{n=1}^{\infty} [a_n |n, B\rangle + b_n |n, A\rangle] + (t + \delta t) \sum_{n=1}^{\infty} [a_{n+1} |n, B\rangle + b_n |n+1, A\rangle]. \quad (28)$$

- Brug ortogonaliteten af tilstandene $|m, A\rangle, |m, B\rangle$ til at vise, at

$$\begin{aligned} 0 &= (t - \delta t)a_m + (t + \delta t)a_{m+1} \\ 0 &= (t - \delta t)b_{m+1} + (t + \delta t)b_m. \end{aligned} \quad (29)$$

Hint: Brug $\langle m, A|$ og $\langle m, B|$ ind på ligning (28).

- Ved at virke med $\langle 1, A|$ ind på ligning (28), vis da at $(t - \delta t)b_1 = 0$. Dvs. $b_1 = 0$!

- Brug anden lighed i (29) til at vise, at $b_m = 0$ for alle m .
- Brug nu første lighed i (29) til først at vise, at $a_{m+1} = -a_m(t - \delta t)/(t + \delta t)$. Vis derefter, at

$$a_{m+1} = \left(-\frac{t - \delta t}{t + \delta t} \right)^m a_1. \quad (30)$$

- Lad $c = \ln \frac{t + \delta t}{t - \delta t}$. For hvilket fortegn af δt , er $c > 0$? Vis, at $a_m = (-1)^{m-1} e^{-(m-1)c}$. Overvej, at $|\psi\rangle$ *ikke* er normerbar for $\delta t < 0$.

Det sidste punkt ovenfor viser, at vi ikke kan konstruere den ønskede kanttilstand for $\delta t < 0$. Det kan vi til gengæld for $\delta t > 0$. Explicit har vi altså nu

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n-1} e^{-(n-1)c} a_1 |n, A\rangle = -e^c a_1 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n e^{-nc} |n, A\rangle. \quad (31)$$

- Overvej, at ligning (31) viser, at $|\psi\rangle$ er eksponentielt lokaliseret på kanten, dvs. ved $n = 1$.
- Normér kanttilstanden, dvs. sæt $\langle\psi|\psi\rangle = 1$, og vis at

$$1 = e^{2c} |a_1|^2 \sum_{n=1}^{\infty} e^{-2nc}. \quad (32)$$

- Brug formelen for en geometrisk række: $\sum_{n=0}^{\infty} r^n = \frac{1}{1-r}$ til at vise

$$\sum_{n=1}^{\infty} e^{-2nc} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-2nc} - 1 = \frac{1}{e^{2c} - 1}. \quad (33)$$

- Antag, at a_1 er positiv og reel. Vis da, at

$$a_1 = \left(\frac{e^{2c} - 1}{e^{2c}} \right)^{1/2} = \frac{\sqrt{1 - e^{-2c}}}{e^c} \quad (34)$$

Vi får da endelig, at

$$|\psi\rangle = \sqrt{1 - e^{-2c}} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n-1} e^{-nc} |n, A\rangle. \quad (35)$$

med $c = \ln \frac{t + \delta t}{t - \delta t}$.

- Hvad sker der, hvis $\delta t \rightarrow t$?

- Hvad sker der, hvis $\delta t \rightarrow 0$?

Vi ser altså, at hvis $\mathcal{W} = 1$, så er der en kanttilstand. Hvis $\mathcal{W} = 0$, er der ikke en! Dette forbinder en bulk-effekt, omdrejningstallet der kun afhænger af tilstandene $|\psi_{\pm}, k\rangle$, til en kanteffekt, tilstedeværelsen af en kanttilstand. Det betyder også, at vi kan forudsige, om der vil være en kanttilstand udelukkende ved at analysere bulk (eller det indre) af systemet. Dette er et kraftfuldt værktøj til at finde systemer, der har interessante kanttilstande. F.eks. har en gas af elektroner i et 2D-plan med et ortogonalt magnetfelt, kanttilstande langs randen, som kan lede strøm uden modstand. I dette system er det uhyre svært rent faktisk at konstruere tilstandene eksplicit. Ikke desto mindre kan vi forudsige, at de må være der, og vi kan forudsige, at de leder strøm uden modstand.

Da denne strøm viser sig at være kvantiseret, kan det bruges til meget præcist at måle strøm. Dette blev udnyttet i forberedelsesarbejdet til at lave en ny udgave af SI-enhedssystemet, det internationale system af måleenheder, som forventes at træde i kraft i 2019. Man kan nemlig bruge denne kvantiserede strøm til meget præcist at måle Plancks konstant h . Efter disse meget præcise målinger har man nu *defineret* Plancks konstant til at have en bestemt værdi. På denne vis er en række naturkonstanter nu *definerede* størrelser, heriblandt altså Plancks konstant og ligeledes lysets hastighed i vacuum. Disse kan så bruges til at konvertere til de enheder, vi er mere vant til at bruge, en meter for længde, et sekund for tid og et kilogram for masse. Dette erstatter den noget forældede definition af et kilogram som massen af et bestemt standardlod i platin og iridium konstrueret tilbage i 1889. Selvom denne legering er meget modstandsdygtig over for ændringer over tid, er det selvfølgelig ikke perfekt. Derudover vil massen af loddet også ændres en anelse, når det er i kontakt med luft, da luftmolekyler kan sætte sig på overfladen. Da man har flere lodder i samme legering udover standarden, har man da også kunnet påvise, at disse andre lodders masse over tid varierer relativt til standarden. Det betyder altså, at selve definitionen af masse har ændret sig over tid (i størrelsesordenen nogle mikrogram). Dette er selvfølgelig ganske utilfredsstillende og har nu ført til helt nye definitioner, der er uafhængige af sådanne standarder.

Litteratur

- [1] J.J. Sakurai: *Modern Quantum Mechanics*, Revised edition, 1994
- [2] G. Grosso & G. P. Parravicini: *Solid State Physics*, 2nd ed., Academic Press (2014)
- [3] G. M. Bruun: *Lecture Notes for Solid State Physics II* (2016)
- [4] W. P. Su, J. R. Schrieffer & A. J. Heeger: *Phys. Rev.* **42**, 1698 (1979)
- [5] P. St-Jean, V. Goblot, E. Galopin, A. Lemaître, T. Ozawa, L. Le Gratiet, I. Sagnes, J. Bloch & A. Amo: *Nature Photonics* **11**, 651-656 (2017)