Topološki izolatori

Filip Orbanić

Sveučilište u Zagrebu, PMF, Fizički odsjek

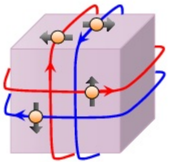
Sadržaj:

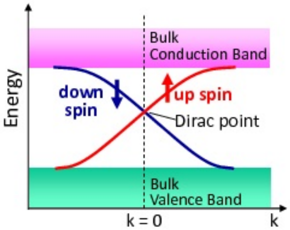
Što je topološki izolator?

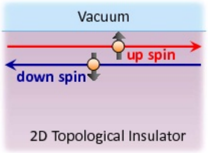
- **Topološki izolator** $\rightarrow$ kvantno stanje materijala koje je karakterizirano posebnim rubnim (2D) ili površinskim (3D) stanjima.
- Kvantno stanje je karakterizirano **topološkom invarijantom**
  - Diskretna vrijednost.
  - Karakteristika je valnih funkcija koje su određene postojanjem procjepa.
    $\Rightarrow$ Ne mjenja se adijabatskom promjenom valnih funkcija (Hamiltonijana). Dok god postoji procjep topološka invarijanta je ista!
- Zatvaranje energijskog procjepa na granici topološkog i običnog izolatora $\Rightarrow$ površinska stanja!
- Trivijalna topološka invarijanta $\rightarrow$ obični izolator.
  Netrivijalna topološka invarijanta $\rightarrow$ topološki izolator.

Što je topološki izolator?

- Što je topološka invarijanta?
- Fizikalna slika površinskih/rubnih stanja?







Berryjeva faza

- Parametar $\vec{R}(t)$ se mjenja po zatvorenoj petlji C.
- Definiramo **Berryjevu fazu** kao

$$\begin{aligned} \gamma_n[C] &= i \oint_c d\vec{R} \, \langle n, \vec{R} | \, \nabla_R \, | n, \vec{R} \rangle \\ &\equiv - \oint_c d\vec{R} \cdot \vec{A}_n(\vec{R}) \end{aligned} \tag{1}$$

$$\vec{A}_n(\vec{R}) = -i \, \langle n, \vec{R} | \, \nabla_R \, | n, \vec{R} \rangle \rightarrow \text{Berryjeva koneksija} \tag{2}$$

- $\gamma_n[C]$ je faza koju $|n, \vec{R}\rangle$ akumulira kada $\vec{R}$ napravi zatvorenu petlju.

Kvantni Hallov efekt kao topološki izolator

- 2D elektronski sustav dimenzija $L \times L$.
- $\vec{E}$-polje i $\vec{B}$-polje. $\vec{B}$ u z-smjeru, $\vec{E}$ u y-smjeru.
- efekt $\vec{E}$-polja tretiramo kao smetnju $\rightarrow -eEy$.
- Račun smetnje (1. red):

$$|n\rangle_E = |n\rangle + \sum_{m(\neq n)} \frac{\langle m| - eEy\,|n\rangle}{E_n - E_m} |m\rangle \tag{3}$$

- Može se izračunati $\langle j_x \rangle_E$, a zatim i σ_{xy} (E-polje je u y-smjeru).

$$\langle j_x \rangle_E = \sum_n f(E_n) \, {}_E\langle n| \frac{ev_x}{L^2} |n\rangle_E \rightarrow \sigma_{xy} = \frac{\langle j_x \rangle_E}{E} \tag{4}$$

Kvantni Hallov efekt kao topološki izolator

- Pretpostavimo da su elektroni opisani Blochovim stanjima, vrijedi:

$$\langle u_{m\mathbf{k}'} | v_\mu | u_{n\mathbf{k}} \rangle = \frac{1}{\hbar}(E_{n\mathbf{k}} - E_{m\mathbf{k}'}) \langle u_{m\mathbf{k}'} | \frac{\partial}{\partial k_\mu} | u_{n\mathbf{k}} \rangle \tag{5}$$

$$\sigma_{xy} = -\frac{ie^2}{\hbar L^2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{n(\neq m)} f(E_{n\mathbf{k}}) \left(\frac{\partial}{\partial k_x} \langle u_{n\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial k_y} | u_{n\mathbf{k}} \rangle - \frac{\partial}{\partial k_y} \langle u_{n\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial k_x} | u_{n\mathbf{k}} \rangle \right) \tag{6}$$

- Berryjeva koneksija $\vec{A}_n(\mathbf{k})$ za Blochova stanja

$$\vec{A}_n(\mathbf{k}) = -i \langle u_{n\mathbf{k}} | \nabla_k | u_{n\mathbf{k}} \rangle = -i \langle u_{n\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle \tag{7}$$

$$\Rightarrow \boxed{\sigma_{xy} = \nu \frac{e^2}{h}} \tag{8}$$

Kvantni Hallov efekt kao topološki izolator

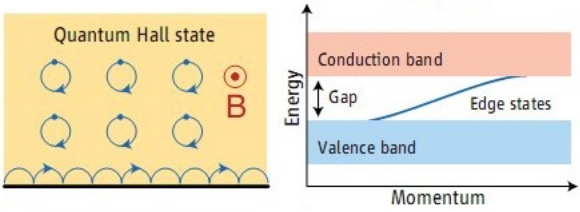
$$\nu = \sum_n \int_{BZ} \frac{d\mathbf{k}}{2\pi} \left(\frac{\partial A_{ny}}{\partial k_x} - \frac{\partial A_{nx}}{\partial k_y} \right) \equiv \sum_n \nu_n \tag{9}$$

$$\begin{aligned}
\nu_n &= \int_{BZ} \frac{d\mathbf{k}}{2\pi} \left(\frac{\partial A_{ny}}{\partial k_x} - \frac{\partial A_{nx}}{\partial k_y} \right) \\
&= \int_{BZ} \frac{d\mathbf{k}}{2\pi} \nabla_k \times \vec{A}_n(\mathbf{k}) \\
&= \frac{1}{2\pi} \oint_{\partial BZ} d\mathbf{k} \cdot \vec{A}_n(\mathbf{k}) \\
&= -\frac{1}{2\pi} \gamma_n[\partial BZ]
\end{aligned} \tag{10}$$

- Jednoznačnost valne funkcije $\Rightarrow \boxed{\gamma_n = 2\pi m}$, $m \in \mathbb{Z}$.
- σ_{xy} je kvantizirana!

Kvantni Hallov efekt kao topološki izolator

- Cijeli broj ν naziva se TKNN invarijanta i predstavlja topološku invarijantu za kvantni Hallov sustav.
- ν broji Landauove nivoe. Ako je $B = 0 \rightarrow \nu = 0$.



TI simetrični na vremensku inverziju

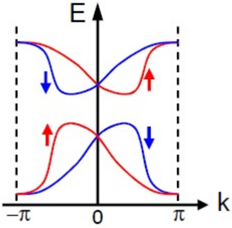
- Kvantni Hall efekt predstavlja sustav slomljene vremenske inverzije.
- Može li postojati TI koji čuva vremensku inverziju (TRS-TI)?

Kramerov teorem

$$\mathcal{H}\left|\psi_{n\mathbf{k}}\right\rangle = E_{n\mathbf{k}}\left|\psi_{n\mathbf{k}}\right\rangle \qquad\qquad H(\mathbf{k})\left|u_{n\mathbf{k}}\right\rangle = E_{n\mathbf{k}}\left|u_{n\mathbf{k}}\right\rangle$$
$$\Rightarrow$$
$$\left|\psi_{n\mathbf{k}}\right\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\left|u_{n\mathbf{k}}\right\rangle \qquad\qquad H(\mathbf{k}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\mathcal{H}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

- Ako vrijedi $[\mathcal{H}, \Theta] = 0$

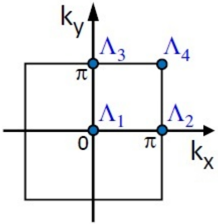
$$\Rightarrow H(\text{-}\mathbf{k}) = \Theta H(\mathbf{k})\Theta^{-1} \rightarrow \textbf{Kramerov teorem} \tag{11}$$



- Dva stanja su degenerirana kada vrijedi $\mathbf{k} = -\mathbf{k}$ $\rightarrow$ vremenski invarijantni impulsi (TRIM)

Z_2 invarijanta (2D)

- Što je topološka invarijanta kod TRS-TI?
- 2D kubični sustav.



- 2 energetska stanja koja čine Kramerov par $\rightarrow |u_1(\mathbf{k})\rangle, |u_2(\mathbf{k})\rangle$
- Računa se razlika polarizacija $\uparrow$ stanja i $\downarrow$ stanja $P_\Theta = P_1 - P_2 \Rightarrow$ $\boxed{P_\Theta = 0, 1}$ $\Rightarrow$ dva moguća polarizacijska stanja!

$$P_i = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} A_{ii}(k) \tag{12}$$

- Razlika polarizacijskih stanja između dva TRIM-a

$$\Delta = P_\Theta(\lambda_i) - P_\Theta(\lambda_j) = 0, 1 \tag{13}$$

Z_2 invarijanta (2D)

$$(-1)^{\Delta} = \prod_{i=1}^{4} \frac{w_{12}(\lambda_i)}{\sqrt{w_{12}(\lambda_i)^2}} \tag{14}$$

- $w_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \langle u_{\alpha-\mathbf{k}} | \Theta | u_{\beta\mathbf{k}} \rangle$, $\lambda_i \to$ TRIM.
- Poopćenjem na $2N$ vrpci (N Kramerovih parova)

$$(-1)^{\nu} = \prod_{i=1}^{4} \delta(\lambda_i) \tag{15}$$

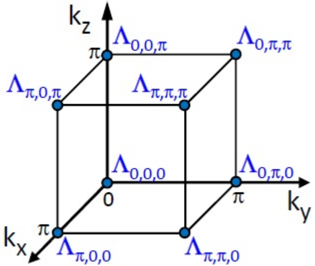
$$\delta(\lambda_i) = \frac{Pf[w(\lambda_i)]}{\sqrt{det[w(\lambda_i)]}} \tag{16}$$

$$\boxed{\nu = 0, 1} \quad Z_2 \textbf{ topološka invarijanta} \tag{17}$$

- $\nu = 0 \to$ trivijalna topološka invarijanta
  $\nu = 1 \to$ netrivijalna topološka invarijanta.

Z_2 invarijanta (3D)

- 3D kubični sustav $\rightarrow$ 8 TRIM



  - 6 ravnina: $x = 0$, $x = \pm\pi$, $y = 0$, $y = \pm\pi$, $z = 0$, $z = \pm\pi$ posjeduje simetriju 2D BZ $\Rightarrow$ 6 Z_2 invarijanti: x_0, x_1, y_0, y_1, z_0, z_1.
  - $x_0 x_1 = y_0 y_1 = z_0 Z_1 \Rightarrow$ 4 nezavisne Z_2 ivarijante!

Z_2 invarijanta (3D)

$$\delta(\lambda_i) = \frac{Pf[w(\lambda_i)]}{\sqrt{det[w(\lambda_i)]}} \tag{18}$$

- 4 Z_2 invarijante:

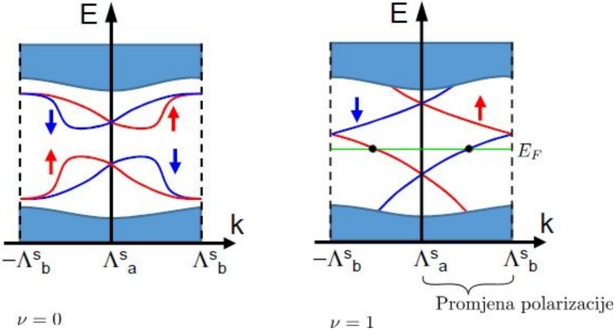
$$(-1)^{\nu_0} = \prod_{n_j=0,\pi} \delta(\lambda_{n_1,n_2,n_3}) \tag{19}$$

$$(-1)^{\nu_i} = \prod_{\substack{n_{j\neq i}=0,\pi \\ n_i=\pi}} \delta(\lambda_{n_1,n_2,n_3}), \quad i = 1,2,3 \tag{20}$$

- $\nu_0 = 1 \Rightarrow$ jaki TI
  $\nu_0 = 0,\ \nu_i = 1 \Rightarrow$ slabi TI.

Z_2 invarijanta (3D)

- $\nu_i = 1 \Rightarrow$ postoji promjena polarizacije spin gore i spin dole stanja između dva TRIM-a u BZ! $\Rightarrow$ Pojava površinskih stanja!



- Površinska stanja zaključanog heliciteta.

TI sa simetrijom na prostornu inverziju

$$\Pi |\vec{x}, \sigma\rangle = |-\vec{x}, \sigma\rangle \tag{21}$$

- Jednostavnije računanje Z_2 invarijante.
- dobiva se:

$$\delta(\lambda_i) = \frac{Pf[w(\lambda_i)]}{\sqrt{det[w(\lambda_i)]}} = \prod_{n=1}^{N} \xi_{2n}(\lambda_i) \tag{22}$$

- $\xi_{2n} \to$ svojstvene vrijednosti operatora inverzije (paritet) n-tog okupiranok Kramerovog para. Za 2D sustav:

$$(-1)^{\nu} = \prod_{i=1}^{4} \prod_{n=1}^{N} \xi_{2n}(\lambda_i) \tag{23}$$

- Kako izolator dobiva netrivijalnu invarijantu?
- Kako teorijski predvidjeti koji materijal može biti topološki izolator?

BHZ model

- Dvije s i dvije p orbitale blizu Fermi nivoa $\Rightarrow$ 4 vrpce (orbitale).

$$|s,\uparrow\rangle\,,\quad |s,\downarrow\rangle\,,\quad |p_x+ip_y,\uparrow\rangle\,,\quad |p_x-ip_y,\downarrow\rangle \tag{24}$$

- 2D kvadratna rešetka, vektori rešetke $\vec{a}_1$ i $\vec{a}_2$.
- H u medelu čvrste veze:

$$\begin{aligned} H = & \sum_i \sum_{\alpha=s,p} \sum_{s_z=\pm} \epsilon_\alpha C^\dagger_{i,\alpha,s_z} C_{i,\alpha,s_z} \\ & - \sum_i \sum_{\alpha,\beta} \sum_{\mu=\pm x,\pm y} \sum_{s_z=\pm} t^{\alpha\beta}_{\mu s_z} C^\dagger_{i+\mu,\alpha,s_z} C_{i,\beta,s_z} \end{aligned} \tag{25}$$

- prelazak u **k**-prostor i uz Diracove matrice.

$$H(\mathbf{k}) = d_0(\mathbf{k})I + \sum_{a=1}^{5} d_a(\mathbf{k})\Gamma_a \tag{26}$$

BHZ model

$$
\begin{aligned}
d_0(\mathbf{k}) &= \frac{\epsilon_s + \epsilon_p}{2} - (t_{ss} - t_{sp})(cos\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1 + cos\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2) \\
d_1(\mathbf{k}) &= 0 \\
d_2(\mathbf{k}) &= 0 \\
d_3(\mathbf{k}) &= 2t_{sp}sin\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2 \\
d_4(\mathbf{k}) &= 2t_{sp}sin\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2 \\
d_5(\mathbf{k}) &= \frac{\epsilon_s - \epsilon_p}{2} - (t_{ss} + t_{sp})(cos\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1 + cos\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2)
\end{aligned}
$$

- Svojstvene energije:

$$
E(\mathbf{k}) = d_0(\mathbf{k}) \pm \sqrt{\sum_a d_a(\mathbf{k})^2} \tag{27}
$$

BHZ model

- Svojstva Γ matrica:

$$\Theta\Gamma_a\Theta^{-1} = \begin{cases} -\Gamma_a, & a = 1,2,3,4 \\ \Gamma_a, & a = 5 \end{cases} \tag{28}$$

$$\Pi\Gamma_a\Pi^{-1} = \begin{cases} -\Gamma_a, & a = 1,2,3,4 \\ \Gamma_a, & a = 5 \end{cases} \tag{29}$$

- Na TRIM-u:

$$\begin{aligned} \Theta H(\lambda_i)\Theta^{-1} &= H(\lambda_i) \\ \Pi H(\lambda_i)\Pi^{-1} &= H(\lambda_i) \end{aligned} \qquad \Rightarrow \qquad H(\lambda_i) = d(\lambda_i)I + d_5(\lambda_i)\Gamma_5$$

- $|s,\uparrow\rangle$, $|s,\downarrow\rangle$ i $|p_x + ip_y,\uparrow\rangle$, $|p_x - ip_y,\downarrow\rangle$ čine Kramerove parove i degenerirani su na TRIM-ovima $\lambda_i \Rightarrow |+\rangle$ i $|-\rangle$.

$$\langle +| H(\lambda_i) |+\rangle = d_0(\lambda_i) + d_5(\lambda_i) \equiv E_+ \tag{30}$$

$$\langle -| H(\lambda_i) |-\rangle = d_0(\lambda_i) - d_5(\lambda_i) \equiv E_- \tag{31}$$

BHZ model

$$E_+ = d_0(\lambda_i) + d_5(\lambda_i)$$
$$E_- = d_0(\lambda_i) - d_5(\lambda_i)$$

$$\delta(\lambda_i) = \prod_{n=1}^{N} \xi_{2n}(\lambda_i), \quad (-1)^\nu = \prod_{i=1}^{4} \delta(\lambda_i)$$

- Ako je na λ_i $d_5(\lambda_i) > 0 \Rightarrow E_+ > E_- \Rightarrow \boxed{\delta(\lambda_i) = -1}$
- Ako je na λ_i $d_5(\lambda_i) < 0 \Rightarrow E_+ < E_- \Rightarrow \boxed{\delta(\lambda_i) = +1}$

$$\delta(\lambda_i) = -sgn[d_5(\lambda_i)] \tag{32}$$

- $a_1 = a_2 = \pi \rightarrow \lambda_i = (0,0), (0,1), (1,0), (1,1)$

$$\delta(\lambda(n_1, n_2)) = -sgn\left\{\frac{\epsilon_s - \epsilon_p}{2} - (t_{ss} + t_{sp})\left[(-1)^{n_1} + (-1)^{n_2}\right]\right\} \tag{33}$$

BHZ model

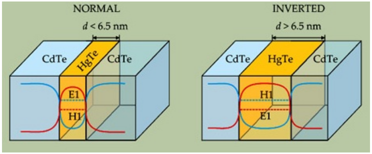
- $\underline{\epsilon_s - \epsilon_p > 4(t_{ss} + t_{sp})} \Rightarrow \nu = 0$

  $E_+ > E_-$ i $\delta(\lambda_i) = -1, \quad \forall \lambda_i$

- $\underline{\epsilon_s - \epsilon_p < 4(t_{ss} + t_{sp})} \Rightarrow \boxed{\nu = 1}$

  $E_+ < E_-$ i $\delta(\lambda(0,0)) = +1$
  $E_+ > E_-$ i $\delta(\lambda(n_1, n_2)) = -1$ za $(n_1, n_2) \neq (0,0)$

- Izolator postaje TI ako postoji **inverzija vrpci** na jednom od 4 TRIM-a $\rightarrow$ *s*-orbitala ispod *p*-orbitale u Γ točki.
- Inverzija vrpci zbog jake spin-orbit interakcije!
- Prvi TI $CdTe/HgTe/CdTe$ kvantna jama!



Zaključak

- Možemo definirati topološku invarijantu. Netrivijalna vrijednost iste nužno vodi na stvaranje površinskih stanja.
- Kvantni Hall efekt je primjer TI narušene simetrije na vremensku inverziju.
- Postoje TI simetrični na vremensku inverziju. Z_2 invarijanta povezana s promjenom polarizacije (nabojne) spin $\uparrow$ i spin $\downarrow$ stanja u vrpcama Kramerovog para na TRIM-ovima. Promjena polarizacijskih stanja između dva TRIM-a nužno vodi na pojavu površinskih stanja koja sijeku Fermi nivo.
- Inverzija vrpci na neparnom broju TRIM-ova vodi na netrivijalnu Z_2 invarijantu.

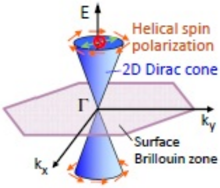
Nastavak priče o TI

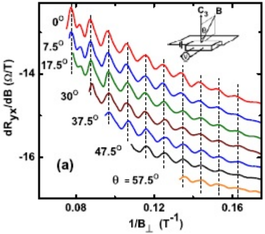
- Oko točke gdje se vrpce Kramerovog para sjeku $\rightarrow$ Diracova disperzija $\Rightarrow$ fizika Diracovih fermiona.
  - $\gamma = \pi$
  - Landauovi nivoi $\propto \sqrt{N}$

    $\vdots$

- Nedisipativna površinska stanja.

- Eksperimentalna potvrda mjerenjem kvantnih oscilacija.





Slika: Yoichi Ando, Topological Insulator Materials

Literatura

- Yoichi Ando, *Topological Insulator Materials*, J. Phys. Soc. Jpn. 82, 102001 (2013).
- Shun-Quing Shen, *Topological Insulators*, Springer Series in Solid-State Sciences.
- M. Z. Hasan, C. L. Cane, Rev. Mod. Phys. 82 (2010) 3045
- Xiao-Liang Qi, *Topological insulators and superconductors*, Rev. Mod. Phys. 83 (2011) 1057.