Toplogikus szigetelők

A Berry fázisról

Globális $U(1)$ fázis szimmetria

Ha $\psi'(r) = e^{i\phi}\psi(r)$, ahol ϕ konstans. A Schrödinger egyenlet erre a transzformációra invariáns. Ez a globális fázis szimmetria, amely semmi más mint a részecskeszám megmaradása. Ennek az operátora $-i\partial_\phi$, azaz $-i\partial_\phi\psi(r,t) = \psi(r,t)$

Lokális fázis szimmetria

Ha $\psi'(r,t) = e^{i\phi(r,t)}\psi(r,t)$, ez a lokális fázis transzformáció. A Schrödinger egyenlet erre nem invariáns.

De egy e töltésű részecskére, a momentum operátor $\vec{p} \to \vec{p} + e\vec{A}$, és $i\partial_t \to i\partial_t - e\phi$ (vector és scalar potenciál)

Ha a következő mérték tanszformációt alkalmazzuk $\phi'(r,t) = \phi(r,t) - \frac{\hbar}{e}\frac{\partial\phi(r,t)}{\partial t}$ és $\vec{A}\,' = \vec{A} + \frac{\hbar}{e}\nabla\phi(r,t)$, akkor $\psi(r,t) \to \psi'(r,t) = \psi(r,t)e^{i\phi(r,t)}$

A Schrödinger egyenlet ezen invarianciája a töltés megmaradását fejezi ki.

A lokális fázis szimmetria a mértéktérrel kapcsolatos.

A Bloch hullámfüggvényekre, amelyek a k térben mutatják ezt a lokális fázis szimmetriát, mondhatjuk, hogy van egy mértéktér, de most nem a valós, hanem a k térben.

Periódikus potenciál terében

$$\psi_{n,k}(r) \to \psi'_{n,k}(r) = e^{i\phi(k)}\psi_{n,k}(r) = e^{i\phi(k)}u_{n,k}(r)e^{ikr}$$

Ha $\vec{\mathcal{A}}_n = -i\langle u_{n,k}|\nabla_k|u_{n,k}\rangle$, akkor a $|u_{n,k}\rangle \to e^{i\phi_n(k)}|u_{n,k}\rangle$ lokális fázis eltolásra

$$\vec{\mathcal{A}}_n \to \vec{\mathcal{A}}'_n = \vec{\mathcal{A}}_n + \nabla_k\phi_n(k)$$

ez teljesen analóg az elektrodinamiai mérték transzformációval, de itt minden a k térben van (a derivált is k szerinti)

A Berry görbület definíciója: $\mathcal{F}_n(k) = \nabla_k \times \vec{\mathcal{A}}_n$

(más, ekvivalens definíciók: egy adott n sáv k pontjának Berry görbületének definiciója

$$\mathcal{F}_n(k) = \iint_{unit\ cell} \left[\nabla_k u_{n,k}(r)\right]^* \times \nabla_k u_{n,k}(r)dr = \epsilon_{ij}\iint_{unit\ cell} \left[\partial_{k,j}u_{n,k}(r)\right]^* \partial_{k,j}u_{n,k}(r)dr$$
$$= i\left(\nabla_k \times \langle u_{n,k}|\nabla_k|u_{n,k}\rangle\right)_z$$

ahol ϵ_{ij} a Levi-Civita szimbólum, $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = 0$, és $\epsilon_{xy} = -\epsilon_{yx} = 1$)

Bloch hullámfüggvényekre (az egyszerűség kedvéért abban az esetben, amikor a sávok távol vannak egymástól

$$\vec{r} = i\vec{\partial}_k - \vec{\mathcal{A}}_n$$

Hasonlóan, ahogy a töltött részecskék esetén a momentum operátora a kanonikus momentumra változik
$\vec{p} = -i\hbar\vec{\partial}_r - e\vec{A}$

Elektromágneses térben a mozgásegyenlet

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F} = e\vec{E} + e\vec{v}\times\vec{B} = -e\vec{\nabla}_r\phi(r) + e\frac{d\vec{r}}{dt}\times\left[\vec{\nabla}_r\times\vec{A}(r)\right]$$

Miután p és r kanonukus konjugált változók, választhatunk, hogy a Hamilton operátort r és ∂_r vagy r és ∂_p függvényeként irjuk fel. A kettő ekvivalens.

Pl. $H = H(\vec{r},\vec{p}) = H\left(\vec{r}, -i\hbar\vec{\partial}_r - e\vec{A}\right)$

A Bloch hullámfüggvények esetén, a fentivel analog módon, egy adott sávra

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{\nabla}_p\epsilon(p) + \frac{d\vec{p}}{dt}\times\left[\vec{\nabla}_p\times\vec{\mathcal{A}}(p)\right]$$

a bal oldal a sebesség, a jobb oldal első tagja a részecske sebessége a második tag az un. anomális sebesség.

A Berry görbület a k térben egy "mágneses teret" jelent.

Ebbe behelyettesítve $\frac{d\vec{p}}{dt}$ fenti kifejezését

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{\nabla}_p\epsilon(p) + \left(e\vec{E} + e\vec{v}\times\vec{B}\right)\times\left[\vec{\nabla}_p\times\vec{\mathcal{A}}(p)\right]$$

vagy p helyett a k hullámszámot írva, amely egy extra $\hbar$ szorzót ad

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{1}{\hbar}\left\{\vec{\nabla}_k\epsilon(k) + \left(e\vec{E} + e\vec{v}\times\vec{B}\right)\times\left[\vec{\nabla}_k\times\vec{\mathcal{A}}(k)\right]\right\}$$

A Hall effektusra térve, legyen $\vec{\nabla}_k\times\vec{\mathcal{A}}(k) = \mathcal{F}(k)\hat{z}$ ($\hat{z}$ a z irányú egységvektor)

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{1}{\hbar}\left[\vec{\nabla}_k\epsilon(k) + \left(e\vec{E}\times\hat{z} + e\vec{v}\times\vec{B}\times\hat{z}\right)\mathcal{F}(k)\right]$$

Ha minden elektron ugyanolyan sebességgel halad, az áram

$$j = env = \frac{eNv}{A}$$

azonban a különböző hullámszámú elektronok sebessége is külöböző, így $Nv = \sum_{n,k\in occupied} v_{n,k}$

tehát

$$j = \frac{e}{A} \sum_{n,k \in occupied} \frac{1}{\hbar} \left[\nabla_k \epsilon(k) + \left(e\vec{E} \times \hat{z} + e\vec{v} \times \vec{B} \times \hat{z} \right) \mathcal{F}_n(k) \right]$$

A Hall effektusnál csak az E -re merőleges áram jelenik meg,

$$j_H = \frac{e}{A} \sum_{n,k \in occupied} \frac{1}{\hbar} e\vec{E} \times \hat{z} \mathcal{F}_n(k) = \frac{e^2}{\hbar} \vec{E} \times \hat{z} \frac{1}{A} \sum_{n,k \in occupied} \mathcal{F}_n(k)$$

így a Hall vezetőképesség

$$\sigma_{xy} = \frac{j_H}{E} = \frac{e^2}{\hbar} \frac{1}{A} \sum_{n,k \in occupied} \mathcal{F}_n(k)$$

A teljesen betöltött sávokra

$$\sum_{n,k \in occupied} \mathcal{F}_n(k) = A \int_{BZ} \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \mathcal{F}_n(k)$$

A nem teljesen betöltött sávoknál csak a Fermi energiáig kell integrálni.

Egy felület adott pontjának Gauss görbületének definiciója a következő: az adott pontra illeszkedő körök közül a legkisebb és a legnagyobb inverz rádiuszú a fő görbületek. Ezek szorzata az adott pont Gauss görbülete. Ezen a Gauss görbület teljes felületre (manifold) való integrálja a teljes Gauss görbület

$$\chi_M = \frac{1}{2\pi} \oiint KdS$$

2D ben a zárt manifoldokra ez mindíg egy egész szám. Ez a topologikus index. Ha két felület adiabatikus deformációval egymásba vihető, akkor ugyanaz a topologiájuk. Pl. egy gömb és egy kocka, vagy egy torusz és egy csésze, stb.

Ha a felület irányított és zárt, azaz a felület két oldala definiálható, akkor a topológikus index páros szám, ha nem pl. egy Möbius szalag akkor lehet páratlan szám is.

Gömb: $\chi_M = 2$. Tórusz: $\chi_M = 0$. Kétszeres tórusz: $\chi_M = -2$

Egy manifold g genuszának definíciója: $g = 1 - \frac{\chi_M}{2}$

Irányitott zárt manifoldokra ez durván az, hogy hány lyuk van benne.

Matematikai szempontból a B mágneses tér, az $\mathcal{F}$ Berry fázis és a K Gauss görbület ekvivalens.

$$\oiint_{\mathcal{M}} BdS = \oiint_{\mathcal{M}} B_n dS = \frac{\hbar}{2q_e} n$$

ez a mágneses töltés kvantáltsága (n a mágneses monopolusok száma $\mathcal{M}$ belsejében).

Ez ekvivalens az elektromos töltére vonatkozó Gauss törvénnyel, és tudjuk, hogy az elektromos töltés kvantált $q_e = ne$

$$q_e = \oiint_{\mathcal{M}} EdS$$

Persze mágneses monopolust nem láttunk, különben is $\nabla B = 0$, tehát $n = 0$

$$\oiint_{\mathcal{M}} KdS = 2\pi\, \chi_{\mathcal{M}}$$

$\chi_{\mathcal{M}}$ egész szám az $\mathcal{M}$ manifold topologiai jellemzőjét méri

$$\oiint_{BZ} \mathcal{F}\, d\vec{k} = 2\pi C$$

Matematikailag a Berry görbület ugyanolyan mint a Gauss görbület, így a teljes Berry görbület ugyanúgy topologikus indexet ad. Ezt a topologikus indexet Chern számnak nevezik

$$C_n = \frac{1}{2\pi} \int_{BZ} \mathcal{F}_n(k)\, d^2k$$

minden sávra definiálhatjuk a topologikus indexét.

Szigetelőkre a topologikus indexet úgy definiálhatjuk, hogy az a Chern számok összege minden teljesen betöltött sávra.

$$C = \sum\nolimits_{filled\ bands} C_n$$

A teljes Chern szám nem más mint a királis élállapotok száma.

Ha $C = 0$ ez a közönséges szigetelő, nincsenek élállapotok $\left(\sigma_{xx} = 0, \sigma_{xy} = 0\right)$. Ha $C \neq 0$ akkor ezt a szigetelőt topologikus szigetelőnek vagy Chern szigetelőnek nevezzük. Ez C királis élállapotot tartalmaz. Vezetőképessége $\sigma_{xx} = 0$, Hall vezetőképessége $\sigma_{xy} = C\, {e^2}/{h}$.

Szigetelő esetén minden sáv teljesen betöltött.

Meg kell jegyezni, hogy a teljes Gauss görbület csak akkor kvantált, ha csak olyan 2D manifoldokat vizsgálunk amelynek nincsenek határai. A Berry görbület esetében, akkor kapunk kvantált Chern számot, amennyiben az integrál a teljes Brillouin zónára terjed ki. Fémek esetében a vezetési sáv csak részlegesen betöltött az integrálás csak a betöltött állapotokra terjed ki. A Fermi tengernek van egy határa ez a Fermi felület. Ha a manifoldnak van határa, akkor az integrál nem kvantált. Ez az oka, hogy egy fémben nincs kvantált Hall effektus, a szigetelőkben lehet. Ezek a topologikus szigetelők, topologikus fém nincs.

Egyéb topológikus szigetelők (az előbbi általánosítása)

A Chern számon kívül egyéb topologikus indexek is lehetnek. Amennyiben bizonyos szimmetriákat megkövetelünk (pl. időtükrözési szimmetria) egyéb topologikus indexeket is definiálhatunk szigetelőkre. Ha bármelyik topologikus index zérustól különbözik a szigetelő topologikus szigetelő. Ezeket szimmetria által védett topologikus szigetelőknek nevezzük. A topologikus szigetelők közös tulajdonságai

- egy topologikus index zerustól különböző
- A bulk szigetelő de az él (2D szigetelőkre) vagy a felület fémes állapotú
- Az él (vagy felületi) fém állapot különbözik a $d-1$ dimenzióban a normál fémes állapottól, tipikusan az a normál álapot fele
- Az él (felületi) állapotok kvantumos viselkedést okozhatnak
- A szimmetria védett topologikus szigetelőknél, a fémes él (felületi) állapotok sérülnek (eltűnhetnek) ha a szimmetria megsérül

Ha semmiféle szimmetriát nem tételezünk fel, akkor az egyetlen ismert topologikus index a Chern szám, amelyet csak páros dimenzió esetén lehet definiálni. Pl. kvantum Hall állapotok léteznek 2D-ben, de 3D-ben nem.

Szimmetria által védett topologikus szigetelőknél, időtükrözési szimmetria esetén 2D és 3D-ben is létezhetnek.

Miért van a topologikus szigetelőkben fémes él vagy felületi állapot?

A véges méretű topologikus szigetelőt vákum veszi körül. A vákum közönséges szigetelő ($C=0$). A bulk-ban a topologikus index $\neq 0$. A topologikus index diszkrét, nem tud folytonosan változni. A topologikus indexet csak ugy lehet változtatni, hogy leromboljuk a szigetelő állapotot, két különböző topologikus indexű állapot között egy fémes állapotnak kell lennie. Ugyanez történik a kvantum Hall effektusnál két plátó között.

Miért olyan pontos a Hall vezetőképesség egy Chern szigetelőben?

Egy szigetelő Hall vezetőképességét a hullámfüggvény topologiája határozza meg. Ez nagyon robosztus és pontos. Ha a rendszert perturbáljuk, σ_{xy} nem fog változni mindaddig amíg a perturbáció nem változtatja meg a topologiai strukturáját.

Bár, itt a topologia és a kvantum Hall effektus kapcsolatát csak egy nem kölcsönható elektron rendszerre mutattuk meg, meg lehet mutatni, hogy ugyanez a helyzet egy kölcsönható rendszerben is.

A Berry fázis:

Egy időfüggő Hamilton operátor esetén, amennyiben az időfüggás lassú, egy sajátállapotból kiindulva, ugyanabban a sajátállapotban maradunk, az állapotnak csak a fázisa változik.

Ha $|\psi(t=0)\rangle = |\chi_n(t=0)\rangle$, akkor $|\psi(t)\rangle = e^{i\phi(t)}|\chi_n(t)\rangle$. Ez a $\phi(t)$ fázis két részből áll. Az állapot energiáját tartalmazó $-\frac{E_n t}{\hbar}$ fázisból és egy geometriai jellegű fázisból, amit Berry fázisnak nevezünk.

$$\phi_B(t) = \int_0^t d\tau \left\langle \chi_n(\tau) \middle| i\frac{d}{d\tau} \middle| \chi_n(\tau) \right\rangle$$

Ha a Hamilton operátor időfüggése az $\{R_j(\tau)\}$ paraméterek időfüggései következménye, akkor

$$\phi_B(t) = \int_{R_i}^{R_f} d\vec{R}\, \langle \chi_n(\tau)| i\nabla_R |\chi_n(\tau)\rangle$$

Amennyiben a Hamilton operátor $t = T$ esetén visszatér a $t = 0$ értékébe,azaz $H(T) = H(0)$, akkor ez egy körintegrál

$$\phi_B(t) = \oint d\vec{R}\, \langle \chi_n(\tau)| i\nabla_R |\chi_n(\tau)\rangle$$

Ez ugyanolyan alakú mint a mágneses fluxus és a vektorpotenciál közötti kapcsolat

$$\phi_B(t) = \oint d\vec{r}\, \vec{A}$$