

Estructura de la Materia 2

Clase 15 - Teoría

Docentes

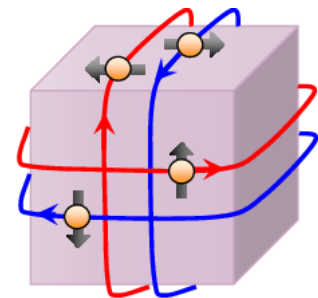
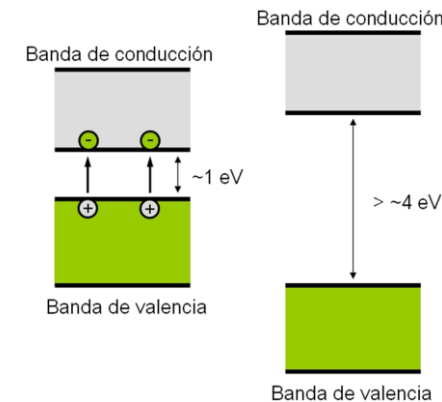
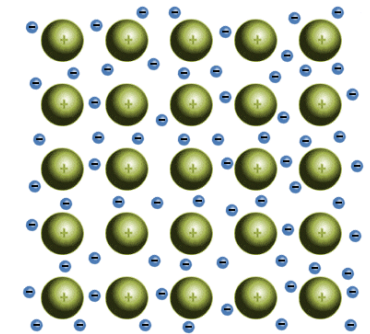
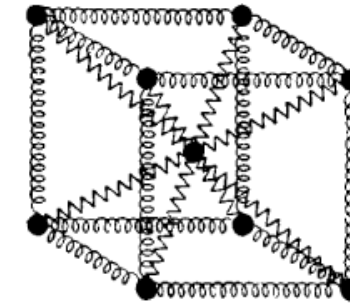
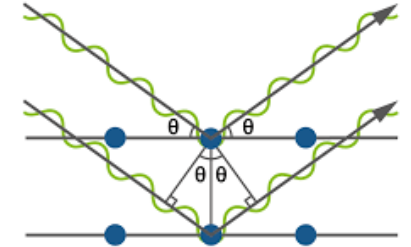
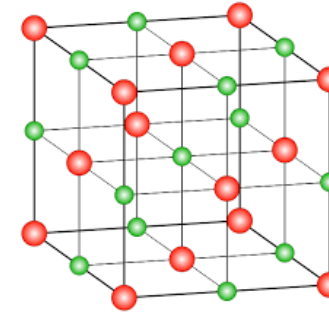
Gustavo Grinblat, Andrea Barral, Tomás Bortolin, Agustina Casafuz

Departamento de Física, FCEN, UBA – 2do Cuatrimestre, 2020

Web: <http://materias.df.uba.ar/edlm2a2020c2>

Programa de la materia

- Red cristalina, red recíproca y difracción de rayos X ✓
- Clasificación de los sólidos y energía de cohesión ✓
- Vibraciones, fonones y propiedades térmicas ✓
- Electrones en sólidos ✓
- Semiconductores y juntura semiconductoras ✓
- Magnetismo en sólidos ✓
- Introducción a los aisladores topológicos

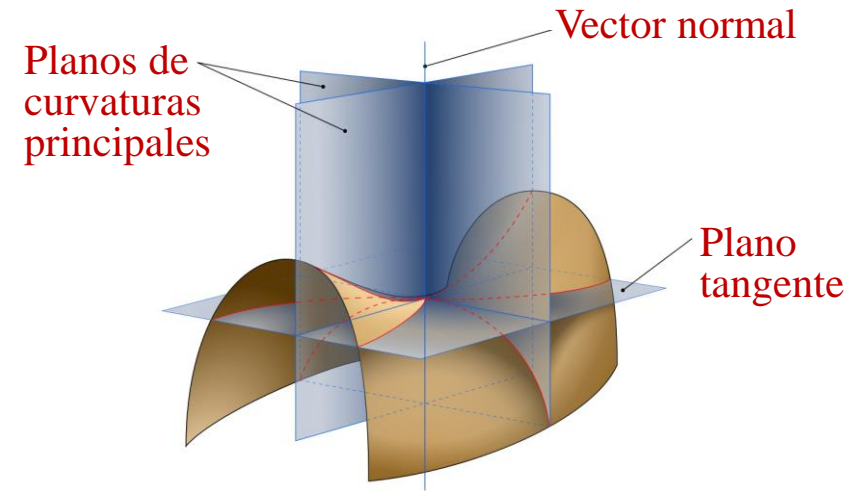


Topología: Introducción

Topología

La topología es una rama de las matemáticas que estudia propiedades geométricas de objetos que son invariantes ante deformaciones continuas.

Se dice que dos objetos son topológicamente equivalentes si pueden transformarse el uno en el otro mediante deformaciones como doblar, retorcer, expandir, contraer, etc., pero sin separar lo que estaba unido, ni pegar lo que estaba separado.



Teorema de Gauss-Bonnet (para superficies cerradas):

$$\chi = \frac{1}{2\pi} \int_S K dA = (2 - 2g) \quad \rightarrow \text{Para una esfera: } K = 1/R^2 \rightarrow \chi = 2, g = 0 \quad (\chi, g \text{ son invariantes topológicos})$$

Curvatura de Gaussiana: $\frac{1}{R_1} \frac{1}{R_2}$

Característica de Euler
Genus (N° de agujeros)

Topología: Introducción

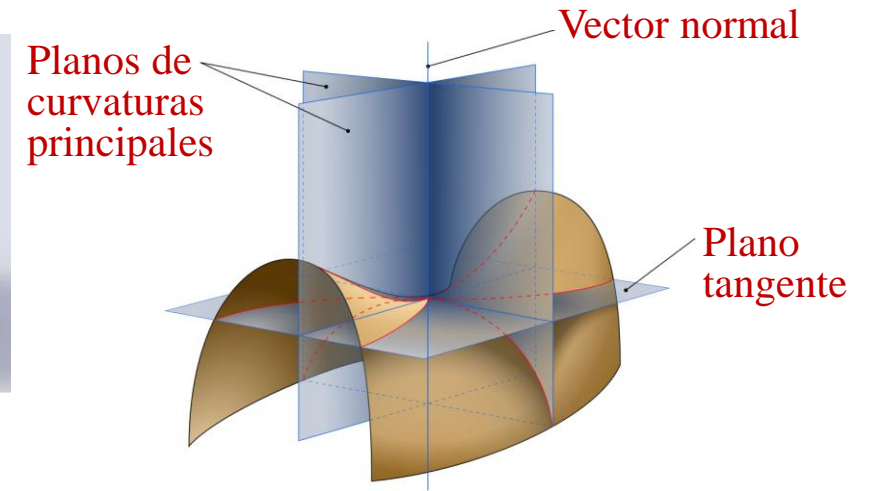
Topología

La topología es una rama de las matemáticas que estudia propiedades geométricas de objetos que son invariantes ante deformaciones continuas.

Se dice que dos objetos son topológicamente equivalentes si pueden transformarse el uno en el otro mediante deformaciones como doblar, retorcer, expandir, contraer, etc., pero sin separar lo que estaba unido, ni pegar lo que estaba separado.



<https://en.wikipedia.org/wiki/Topology>



Teorema de Gauss-Bonnet (para superficies cerradas):

$$\chi = \frac{1}{2\pi} \int_S K dA = (2 - 2g) \quad \rightarrow \quad \text{Para una esfera: } K = 1/R^2 \quad \rightarrow \quad \chi = 2, g = 0 \quad (\chi, g \text{ son invariantes topológicos})$$

Curvatura de Gaussiana: $\frac{1}{R_1} \frac{1}{R_2}$
Característica de Euler
Genus (N° de agujeros)

Fase de Berry

Evolución de un estado cuántico en un proceso adiabático

Consideremos un Hamiltoniano $\mathcal{H}(\bar{R})$, con parámetros $\bar{R} = R_1, R_2, R_3 \dots \rightarrow \mathcal{H}(\bar{R})|n(\bar{R})\rangle = E_n(\bar{R})|n(\bar{R})\rangle$

Partiendo del estado $|n(\bar{R}(t=0))\rangle$, queremos conocer el estado a tiempo t al realizar un recorrido \mathcal{C} en el espacio de parámetros, en forma adiabática. El sistema evolucionará al estado $|n(\bar{R}(t))\rangle$, pero ¿con qué fase?

Escribimos: $|\psi(t)\rangle = e^{-i\theta(t)}|n(\bar{R}(t))\rangle$; $\mathcal{H}(\bar{R}(t))|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle$ Autoestado instantáneo de $\mathcal{H}(\bar{R}(t))$

$$\rightarrow E_n(\bar{R}(t))e^{-i\theta(t)}|n(\bar{R}(t))\rangle = \hbar e^{-i\theta(t)} \left(\frac{d}{dt} \theta(t) \right) |n(\bar{R}(t))\rangle + i\hbar e^{-i\theta(t)} \frac{d}{dt} |n(\bar{R}(t))\rangle$$

$$\rightarrow E_n(\bar{R}(t)) - i\hbar \left\langle n(\bar{R}(t)) \left| \frac{d}{dt} \right| n(\bar{R}(t)) \right\rangle = \hbar \left(\frac{d}{dt} \theta(t) \right)$$

$$\rightarrow \theta(t) = \frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(\bar{R}(t')) dt' - i \int_0^t \left\langle n(\bar{R}(t')) \left| \frac{d}{dt'} \right| n(\bar{R}(t')) \right\rangle dt'$$

Fase de Berry (γ_n)

$$\rightarrow \gamma_n = i \int_0^t \left\langle n(\bar{R}(t')) \left| \nabla_{\bar{R}} \right| n(\bar{R}(t')) \right\rangle \frac{d\bar{R}}{dt'} dt' = i \int_{\bar{R}_0}^{\bar{R}_t} \left\langle n(\bar{R}) \left| \nabla_{\bar{R}} \right| n(\bar{R}) \right\rangle d\bar{R} = \int_{\bar{R}_0}^{\bar{R}_t} \bar{A}_n(\bar{R}) d\bar{R}$$

Potencial de Berry

Fase de Berry

Evolución de un estado cuántico en un proceso adiabático

Consideremos un Hamiltoniano $\mathcal{H}(\bar{R})$, con parámetros $\bar{R} = R_1, R_2, R_3 \dots \rightarrow \mathcal{H}(\bar{R})|n(\bar{R})\rangle = E_n(\bar{R})|n(\bar{R})\rangle$

Partiendo del estado $|n(\bar{R}(t=0))\rangle$, queremos conocer el estado a tiempo t al realizar un recorrido \mathcal{C} en el espacio de parámetros, en forma adiabática. El sistema evolucionará al estado $|n(\bar{R}(t))\rangle$, pero ¿con qué fase?

Fase de Berry: $\gamma_n = \int_{\bar{R}_0}^{\bar{R}_t} \bar{A}_n(\bar{R}) d\bar{R}; \bar{A}_n(\bar{R}) = i \langle n(\bar{R}) | \nabla_{\bar{R}} | n(\bar{R}) \rangle$ Autoestado instantáneo de $\mathcal{H}(\bar{R}(t))$

Potencial de Berry

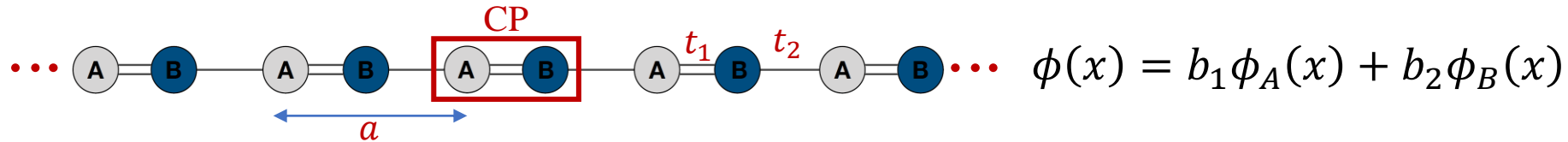
Sabemos que cambiar un estado en una fase global no afecta a la dinámica del sistema: $|n(\bar{R})\rangle \rightarrow e^{i\chi(\bar{R})} |n(\bar{R})\rangle$

¿Pero qué sucede con el potencial y fase de Berry? $\bar{A}_n(\bar{R}) \rightarrow \bar{A}_n(\bar{R}) - \nabla_{\bar{R}} \chi(\bar{R}) \rightarrow \gamma_n \rightarrow \gamma_n - \underbrace{\int_{\bar{R}_0}^{\bar{R}_t} \nabla_{\bar{R}} \chi(\bar{R}) d\bar{R}}_{= \chi(\bar{R}_t) - \chi(\bar{R}_0)}$

→ La fase de Berry resulta invariante si el camino \mathcal{C} es cerrado, y se vuelve una propiedad observable del sistema.

Enlaces fuertes en 1D: Introducción

Enlaces fuertes en red monoatómica 1D con una base y un orbital por sitio



$$\begin{cases} \varepsilon(k)b_1 + (t_1 + t_2 e^{-ika})b_2 = 0 \\ (t_1 + t_2 e^{ika})b_1 + \varepsilon(k)b_2 = 0 \end{cases} \rightarrow \begin{cases} \varepsilon(k) = \pm \sqrt{t_1^2 + 2t_1 t_2 \cos ka + t_2^2} \\ \frac{b_1}{b_2} = -\frac{t_1 + t_2 e^{-ika}}{\varepsilon(k)} = \frac{-t_1 - t_2 \cos ka + t_2 i \sin ka}{\varepsilon(k)} \end{cases}$$

$\varepsilon(k) = X + iY = \sqrt{X^2 + Y^2} e^{i \arctan(Y/X)}$

$$\rightarrow \frac{b_1}{b_2} = \frac{\sqrt{(t_1 + t_2 \cos ka)^2 + t_2^2 \sin^2 ka}}{\varepsilon(k)} e^{i \arctan\left(\frac{t_2 \sin ka}{-t_1 - t_2 \cos ka}\right)} = \pm e^{-i\varphi(k)} \rightarrow |k_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \pm e^{-i\varphi(k)} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$\varphi(k) = \arctan(t_2 \sin ka / (t_1 + t_2 \cos ka))$

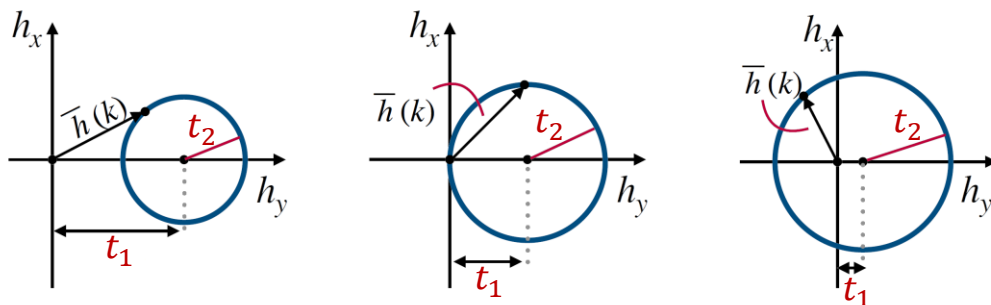
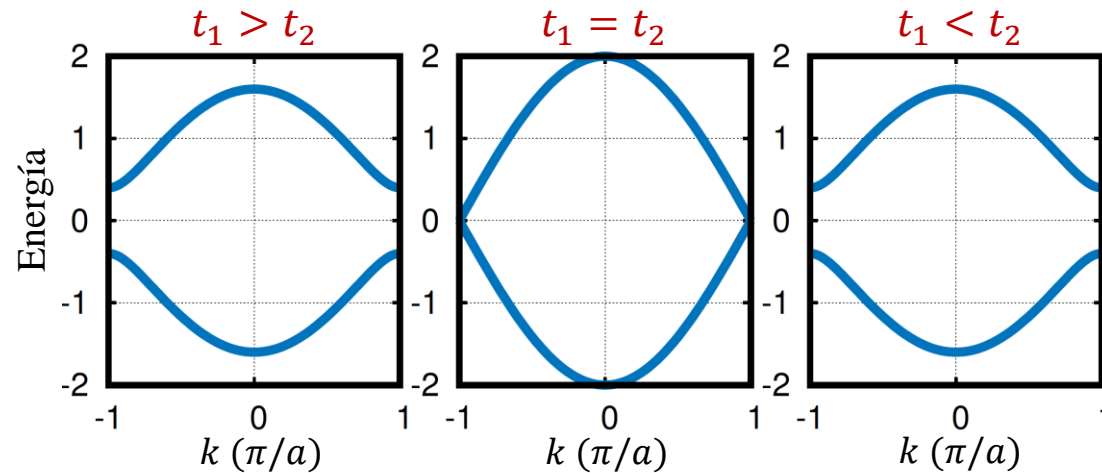
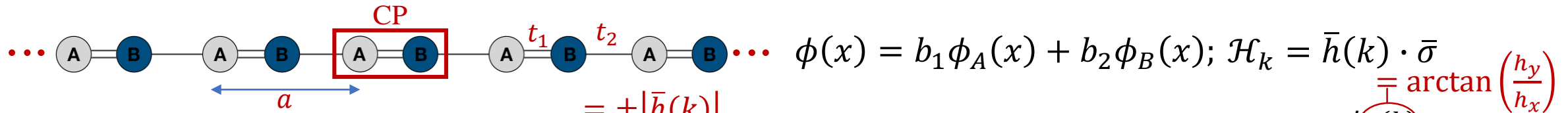
Vector de Pauli

$$\mathcal{H}_k = \bar{h}(k) \cdot \vec{\sigma} = \begin{pmatrix} h_z & h_x - ih_y \\ h_x + ih_y & -h_z \end{pmatrix}; \quad \mathcal{H}_k \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \varepsilon(k) \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \xrightarrow{h_z=0} \begin{cases} (h_x - ih_y)b_2 = \varepsilon(k)b_1 \\ (h_x + ih_y)b_1 = \varepsilon(k)b_2 \end{cases}$$

$$\rightarrow \bar{h}(k) = -(t_1 + t_2 \cos ka, t_2 \sin ka, 0) \rightarrow |\varepsilon(k)| = |\bar{h}(k)|; \quad \varphi(k) = \arctan(h_y/h_x)$$

Enlaces fuertes en 1D: Modelo SSH (Su-Shrieffer-Heeger)

Enlaces fuertes en red monoatómica 1D con una base y un orbital por sitio: Banda llena



Potencial de Berry: $A(k) = i \left\langle k_- \left| \frac{d}{dk} \right| k_- \right\rangle$

$$= \frac{i}{2} \left(-e^{i\varphi(k)} \langle \phi_A | + \langle \phi_B | \right) \frac{d}{dk} \left(-e^{-i\varphi(k)} | \phi_A \rangle + | \phi_B \rangle \right)$$

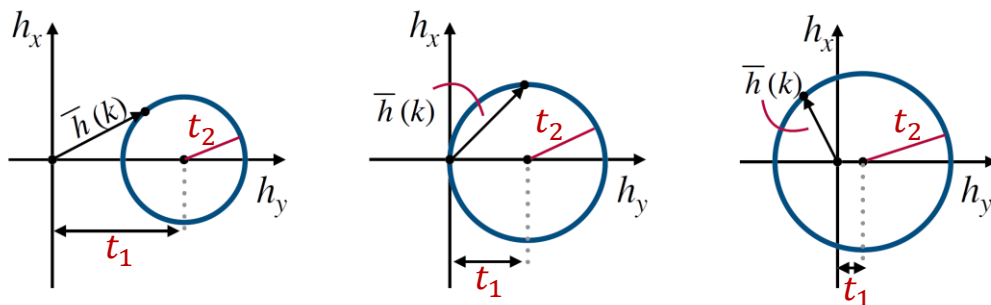
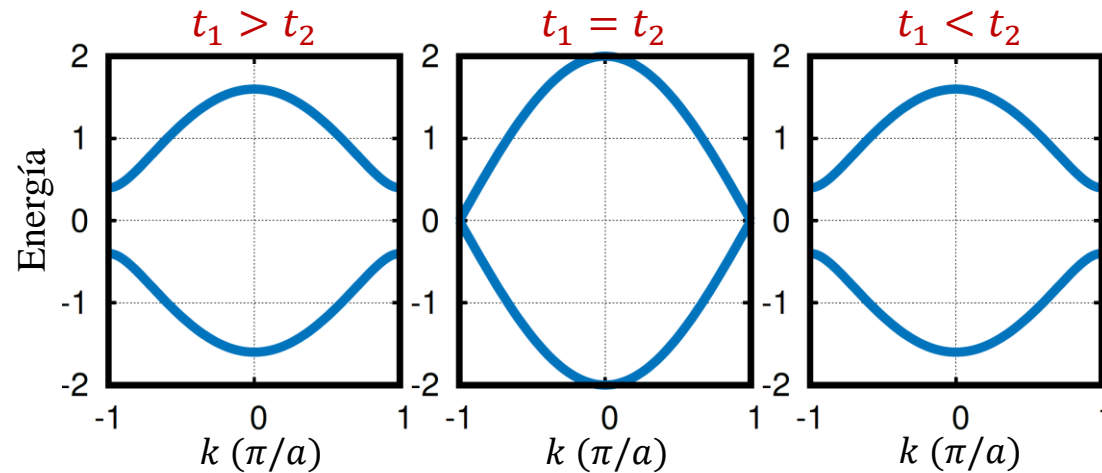
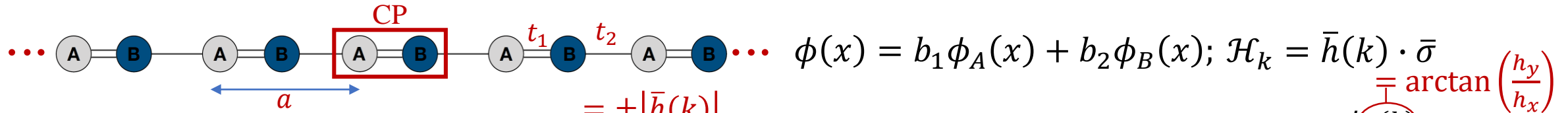
$$= \frac{1}{2} \frac{d\varphi}{dk} \rightarrow \text{Integramos } A(k) \text{ en la 1ZB y medimos en unidades de } \pi \text{ (número de giro, } \nu \text{):}$$

$$\nu = \frac{\gamma}{\pi} = \frac{1}{\pi} \oint A(k) dk = \frac{1}{2\pi} \oint \frac{d\varphi}{dk} dk = \begin{cases} 0, & t_1 > t_2 \\ 1, & t_1 < t_2 \end{cases}$$

$t_1 > t_2$ y $t_2 < t_1$ son topológicamente diferentes! En analogía con el teorema de Gauss-Bonnet, el objeto es ahora la 1ZB, la curvatura Gaussiana el potencial de Berry, y el número de giro la característica de Euler.

Enlaces fuertes en 1D: Modelo SSH (Su-Shrieffer-Heeger)

Enlaces fuertes en red monoatómica 1D con una base y un orbital por sitio: Banda llena



Potencial de Berry: $A(k) = i \langle k_- | \frac{d}{dk} | k_- \rangle$

$$= \frac{i}{2} \left(-e^{i\varphi(k)} \langle \phi_A | + \langle \phi_B | \right) \frac{d}{dk} \left(-e^{-i\varphi(k)} | \phi_A \rangle + | \phi_B \rangle \right)$$

$$= \frac{1}{2} \frac{d\varphi}{dk} \rightarrow \text{Integramos } A(k) \text{ en la 1ZB y medimos en unidades de } \pi \text{ (número de giro, } \nu \text{):}$$

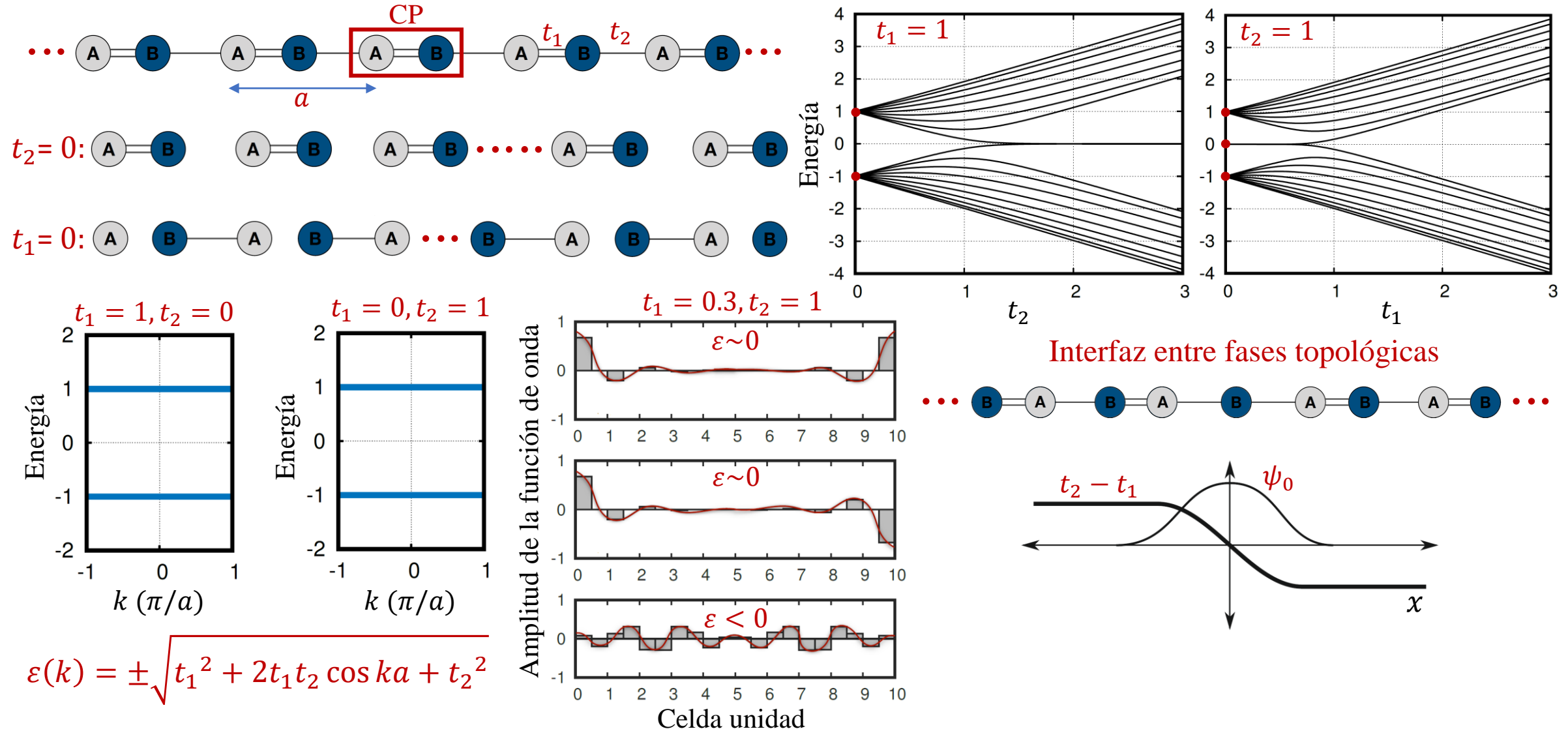
$$\nu = \frac{\gamma}{\pi} = \frac{1}{\pi} \oint A(k) dk = \frac{1}{2\pi} \oint \frac{d\varphi}{dk} dk = \begin{cases} 0, & t_1 > t_2 \\ 1, & t_1 < t_2 \end{cases}$$

Aunque la trayectoria de $\bar{h}(k)$ deje de ser un círculo perfecto (por introducir pequeños cambios en el potencial de Berry, o en \mathcal{H}_k a través de t_1, t_2), ν se mantendrá invariante.

Enlaces fuertes en 1D: Modelo SSH (Su-Shrieffer-Heeger)

arXiv:1906.08435v1

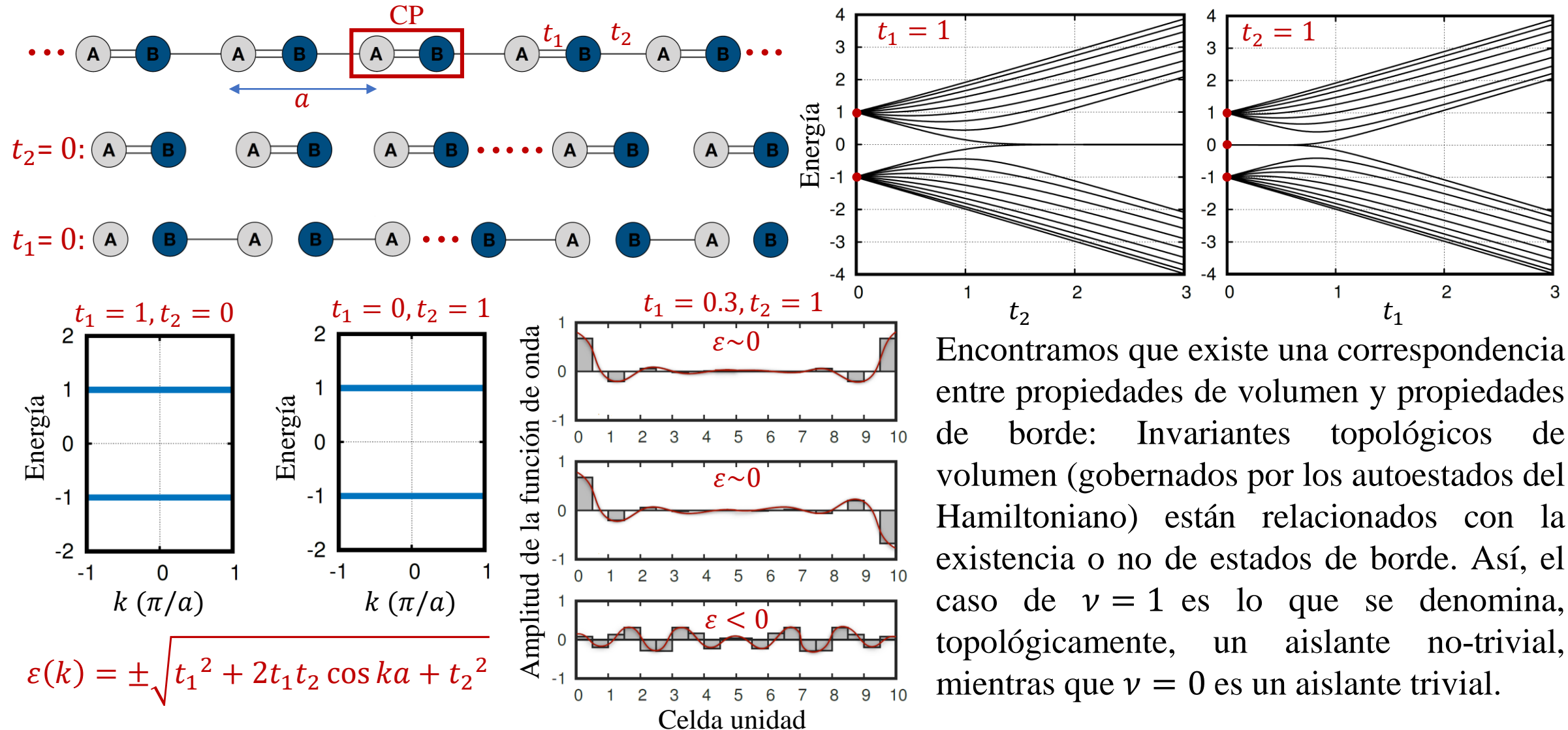
Enlaces fuertes en red monoatómica 1D con una base y un orbital por sitio: Estados de borde



Enlaces fuertes en 1D: Modelo SSH (Su-Shrieffer-Heeger)

arXiv:1906.08435v1

Enlaces fuertes en red monoatómica 1D con una base y un orbital por sitio: Estados de borde



Encontramos que existe una correspondencia entre propiedades de volumen y propiedades de borde: Invariantes topológicos de volumen (gobernados por los autoestados del Hamiltoniano) están relacionados con la existencia o no de estados de borde. Así, el caso de $\nu = 1$ es lo que se denomina, topológicamente, un aislante no-trivial, mientras que $\nu = 0$ es un aislante trivial.

Fases topológicas en 2 dimensiones

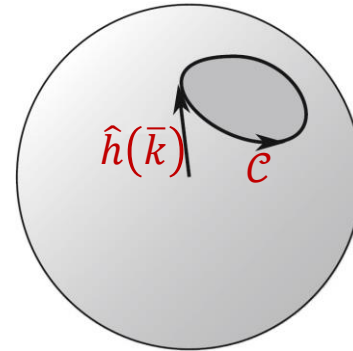
Número de Chern y el efecto Hall cuántico

$$\gamma_n = i \int_{\bar{R}_0}^{\bar{R}_t} \langle n(\bar{R}) | \nabla_{\bar{R}} | n(\bar{R}) \rangle d\bar{R} = \int_{\bar{R}_0}^{\bar{R}_t} \bar{A}_n(\bar{R}) d\bar{R} \rightarrow \text{En 2D (teoría de bandas): } \bar{A}(\bar{k}) = i \langle u_{\bar{k}} | \nabla_{\bar{k}} | u_{\bar{k}} \rangle$$

Integrando en un camino cerrado en el espacio \bar{k} : $\gamma = \oint \bar{A}_n(\bar{k}) \cdot d\bar{k} \stackrel{\text{Teorema de Stokes}}{=} \int_S \mathcal{F} d^2\bar{k}$; $\mathcal{F} = \nabla \times \bar{A}$ (Curvatura de Berry)

En un sistema de 2 niveles: $\mathcal{H}_{\bar{k}} = \bar{h}(\bar{k}) \cdot \bar{\sigma} = \begin{pmatrix} h_z & h_x - ih_y \\ h_x + ih_y & -h_z \end{pmatrix}$

$\rightarrow \gamma = \frac{1}{2} (\text{ángulo sólido barrido por } \hat{h}(\bar{k}))$



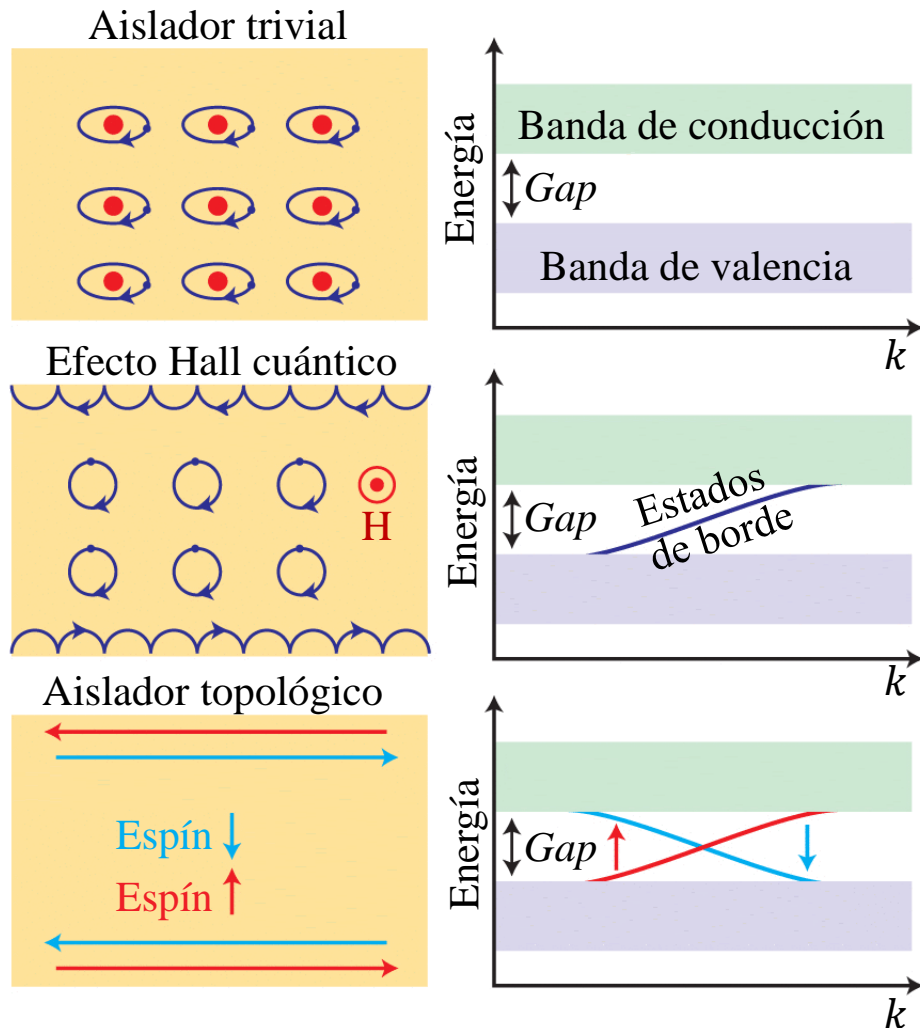
Integrando \mathcal{F} en un espacio cerrado en 2D (1ZB) $\rightarrow n = \frac{\gamma}{2\pi} = \frac{1}{2\pi} \int_S \mathcal{F} d^2\bar{k}$ (Número de Chern)

Puede demostrarse que para la conductividad del efecto Hall cuántico, $\sigma_T = \frac{e^2}{h} n$, $n \in \mathbb{Z}$ es el N° de Chern

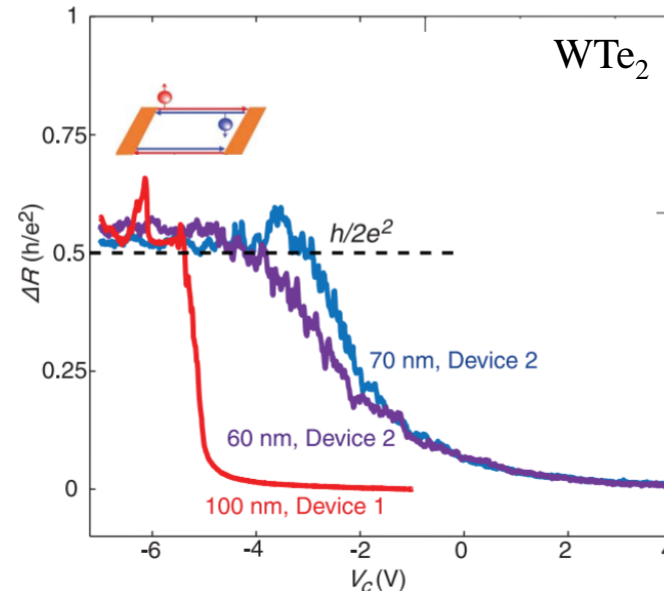
\rightarrow El efecto Hall cuántico es un estado topológicamente no-trivial.

Fases topológicas en 2 dimensiones

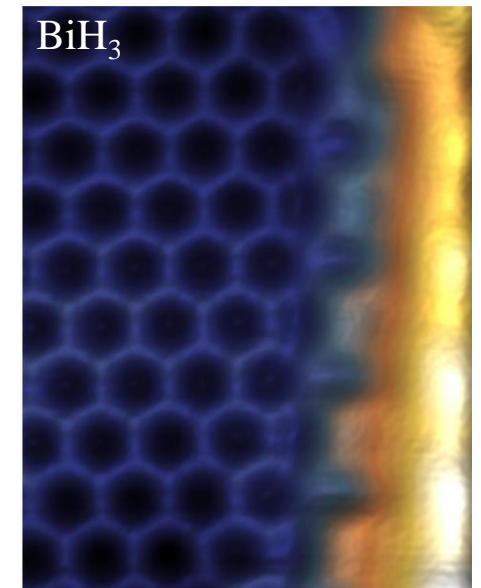
Efecto Hall cuántico y aisladores topológicos



El efecto Hall cuántico de espín (“aislador topológico 2D”) se da en sistemas 2D con fuerte interacción espín-órbita. En los bordes, e^- con espín *up* y *down* se encuentran en estados de tipo efecto Hall cuántico, en los que cada espín percibe un campo magnético efectivo opuesto, que se origina en el acoplamiento espín-órbita (no se aplica un campo magnético externo).



Science 359, 76–79 (2018)



Science 357, 287-290 (2017)

Resumen

- Nociones de topología (teorema de Gauss-Bonnet)
- Fase de Berry (evolución de un estado en un ciclo adiabático)
- Modelo SSH (enlaces fuertes en red 1D con una base)
- Números topológicos (número de giro y número de Chern)
- Efecto Hall cuántico de espín (aislador topológico 2D)

