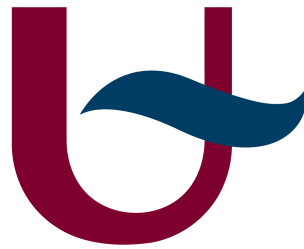


Constructie van modelhamiltonianen van Topologische Isolatoren

Timo Kerremans

Bachelorthesis Fysica



Theory of Condensed Matter
Department Fysica
Universiteit Antwerpen

Promotor: Prof. B. Partoens
Co-Promotor: Drs. C. De Beule

Mei 2015

Abstract

For a couple of years now, an exciting new class of materials has fascinated many condensed matter physicists around the world. The new materials do not belong to the well known insulators, conductors or semi-conductors. Even superconductors are old news compared to this exotic type of materials, the so called Topological Insulators.

This new class includes materials that are insulators in the bulk (i.e. in their interior) but act like conductors on the surface. Moreover, these conducting surface states are protected by symmetries of the Hamiltonian that describes that system. The surface states cannot change to bulk states unless this symmetry is broken, making them very robust and attractive for applications as spintronics and quantum computing.

While experimentalists put their effort in composing and testing potential topological insulators, theorists create and modify models of materials that could bring about topological insulation, under the right conditions. A main part of their work is to construct Hamiltonians and investigate whether they possess symmetries that could enable topological insulation.

In this thesis some simple models are considered and corresponding Hamiltonians are constructed. It will be shown that under certain assumptions, even these simple models can produce topological insulation. In the first part some principles of condensed matter physics will be elucidated. It is in the second part that these principles will be applied to some model systems in order to obtain topological insulator properties.

Inhoudsopgave

Abstract	ii
1 Inleiding	1
1.1 Algemeen beeld	1
1.2 Modelhamiltonianen	2
2 Theoretische achtergrond	3
2.1 Tijdsomkeer symmetrie	3
2.1.1 Tijdsomkeer symmetrie in de kwantummechanica	4
2.1.2 Kramers' theorema	7
2.1.3 Tijdsomkeersymmetrie in kristallen	7
2.1.4 Creatie- en annihilatieoperatoren	9
2.2 1D Toepassing: Polyacetyleen keten	11
2.2.1 Peierls instabiliteit	11
2.2.2 De eindige keten	16
2.2.3 De oneindige keten	21
2.2.4 De overgangsfase	24
2.3 2D toepassing: strip	26
2.3.1 Modelhamiltoniaan	27
2.3.2 Eindige keten	28
2.3.3 Oneindige strip	29
2.3.4 Gapsluitingspunten van de hamiltoniaan	31
2.4 Uitbreiding naar spin 1/2-deeltjes	38
3 Conclusie	39
Appendix I	40
Appendix II	41
Bibliografie	42

Hoofdstuk 1

Inleiding

1.1 Algemeen beeld

In de vastestoffysica kunnen materialen worden onderverdeeld in verschillende klassen op basis van hun elektronische geleiding. Zo zijn er de isolatoren, geleiders en halfgeleiders, elk met hun eigen karakteriserende vorm van geleiding. Het onderscheid tussen de verschillende klassen wordt bepaald door de *bandenstructuur* van een materiaal. Dit is een weergave van de toegestane energieniveaus van de ladingsdragers in een materiaal die tot stand komen door het veelvuldig opsplitsen van energieniveaus van de individuele atomen. Zo ontstaat er een continuüm aan niveaus, een band.

Twee specifieke banden zijn van belang bij de beschrijving van de geleidingseigenschappen van een materiaal, nl. de hoogst volledig gevulde band (de valentieband) en de laagst ongevulde band (de conductieband). Ook het Fermi-energieniveau (het hoogst bezette energieniveau) speelt een belangrijke rol. Zo zal een isolator gedefinieerd worden als een materiaal waarbij het Fermi-energieniveau tussen de top van de valentieband en dal van de conductieband ligt¹. Bij een metaal ligt het Fermi-energiniveau ergens midden in een band, wat soms vergeleken wordt met het overlappen van de conductie- en valentieband.

Bandentheorie is reeds lang gekend en heeft al talrijke, invloedrijke toepassingen zoals de volledige elektronica industrie die gebaseerd is op halfgeleider technologie.

In 1987 werd er echter een eerste theoretische voorspelling gedaan over een nieuwe klasse van materialen^[1]. Deze paper was echter een voorbode, de conclusies beperkten zich tot één beperkt systeem. De eersten die het algemene karakter van deze nieuwe klasse onderzochten en die het belang van symmetrie inzagen waren Kane et al. in 2006.

Deze materialen van deze nieuwe klasse gedragen zich als een isolator in de bulk maar hebben geleidende oppervlaktetoestanden, waardoor het oppervlak zich gedraagt als een geleider. Bovendien zijn deze oppervlaktetoestanden beschermd door een aanwezige symmetrie van de hamiltoniaan en de bandgap die het systeem beschrijft. Dit zorgt ervoor dat deze geleidende toestanden aan het oppervlak robuust zijn. Zulke materialen worden Topologische Isolatoren genoemd.

¹Tot dit geval behoort ook de halfgeleider. Het verschil tussen een isolator en halfgeleider in dit model is enkel bepaald door de grootte van de bandgap.

In 2007 wordt de voorspelling uit 1987 experimenteel bevestigd^[2] en sindsdien gaat er veel aandacht naar topologische isolatie in materialen. Er worden geregeld voorspellingen gedaan over materialen die 3D topologische isolatoren kunnen zijn. Zo werd in 2008 de eerste experimentele verwezelijking van topologische isolatie gedaan, in Bismuth Antimonide^[3]. Kort daarna ontdekte men ook topologisch beschermde randtoestanden in o.a. antimoon, bismuth selenide, bismuth telluride en antimonon telluride^[4].

Het onderzoek naar topologische isolatie kan worden opgedeeld in 2 groepen. Langs de ene kant houden experimentele fysici zich bezig met het verwezelijken van voorspelde topologische isolatoren of manipuleren bepaalde kristalstructuren zo, dat zij voldoen aan voorop gestelde eisen van topologische isolatie. Aan de andere kant houden theoretici zich bezig met het onderzoeken van het fenomeen op zich en proberen zo voorspellingen te doen of restricties op te leggen aan materialen die topologisch beschermde randtoestanden zouden hebben. Het is dit laatste waar deze thesis een inleiding op zal zijn.

1.2 Modelhamiltonianen

Om restricties aan materialen op te leggen, moet er eerst een model van een materiaal worden opgesteld. Zo'n model is meestal een vereenvoudigd kristalrooster waar verschillende aannames worden doorgevoerd. Er kan uitgebreid worden naar meer complexe modellen die praktisch bruikbare materialen beter benaderen, maar dit brengt met zich mee dat de complexiteit van de berekeningen toeneemt.

Wanneer er een model voor een bepaalde kristalstructuur is opgesteld, wordt de hamiltoniaan van het systeem bepaald, dit wordt een modelhamiltoniaan genoemd. Door de modelhamiltoniaan te onderzoeken kan men de bandenstructuur van het kristalrooster bestuderen en hieruit bepalen of het model al dan niet voldoet aan de vereisten van topologische isolatie. Wanneer dit niet het geval is, kan het model worden aangepast door andere aannames te maken.

Wanneer topologische isolatie kan verwezenlijkt worden in de modelstructuur, wordt er verder onderzocht of deze overeenkomt met een symmetrie van de hamiltoniaan. Zo kunnen er symmetrie restricties worden opgelegd aan de hamiltoniaan die nodig zijn om topologische isolatie te verzekeren in het modelmateriaal.

Het is deze procedure die gevolgd wordt in deze thesis om zo tot enkele eenvoudige systemen te komen die, onder voorwaarde van bepaalde aanwezige symmetrieën van de hamiltoniaan, topologisch beschermde randtoestanden opleveren. Er wordt vertrokken van een eenvoudige ééndimensionale keten van atomen waarbij de ladingsdragers spinloos zijn. Dit model wordt dan uitgebreid naar een 2 dimensionaal rooster, nog steeds in het spinloze geval.

Hoofdstuk 2

Theoretische achtergrond

Om te beginnen worden verschillende principes en rekentechnieken toegelicht die nodig zullen zijn voor de beschrijving van topologische isolatoren. Het belangrijkste principe dat topologische isolatoren toelaat te bestaan is symmetrie.

Symmetrieën nemen in de fysica een belangrijke plaats in. Zo zijn er doorheen de geschiedenis tal van fenomenen verklaard door het al dan niet aanwezig zijn van een (tot dan nog niet ontdekte) symmetrie. Dit blijkt in het geval van topologische isolatoren niet anders te zijn. Zo zullen bepaalde symmetrieën in de structuur van een materiaal ervoor zorgen dat deze al dan niet een topologische isolator kan zijn. De voornaamste, en tevens heel algemene, symmetrie die hierbij een belangrijke rol zal spelen is de *tijdsomkeer symmetrie*.

2.1 Tijdsomkeer symmetrie

Intuïtief is deze symmetrie duidelijk: wanneer bij een fenomeen de richting van de tijd wordt omgedraaid (i.e. tijdsomkeer) en hierbij de wetten die het fenomeen beschrijven hun vorm behouden, *dan* bezit dit fenomeen de eigenschap van tijdsomkeer symmetrie. Het proces van tijdsomkeer kan beschreven worden door de tijdsomkeer operator T :

$$T : t \rightarrow -t, \tag{2.1}$$

die inwerkt op een systeem, waarbij de parameter t de tijd voorstelt.

Zo zullen de wetten die de dynamica van starre lichamen in beweging beschrijven een voorbeeld van tijdsomkeer invariante wetten zijn. Daartegenover zijn de wetten die de thermodynamica beschrijven niet tijdsomkeer invariant¹.

Klassiek wordt tijdsomkeer symmetrie als volgt voorgesteld door middel van de transformatie:

$$t \rightarrow -t, x \rightarrow x, p \rightarrow -p \Rightarrow H(x, p) \rightarrow H(x, -p). \tag{2.2}$$

Concreet wordt tijdsomkeer invariantie als volgt gedefiniëerd:

Een systeem met hamiltoniaan $H(x, p)$, heeft tijdsomkeer symmetrie \Leftrightarrow elk koppel $(x(t), p(t))$, oplossing van de Hamilton-vergelijkingen, een onafhankelijke oplossing $(x(-t), p(-t))$ kan gevonden worden die éénduidig gelinkt kan worden met de oorspronkelijke oplossing.

¹Dit wordt duidelijk weergegeven door de 2^{de} wet van de thermodynamica die stelt dat de entropie (of wanorde) van een afgesloten systeem steeds moet toenemen, of op zijn minst constant blijven.

Het voorgaande is louter klassiek en is dus niet bruikbaar voor de kwantummechanische beschrijving van topologische isolatoren. Hierdoor is een uitbreiding van tijdsomkeer symmetrie naar de kwantummechanica absoluut nodig.

2.1.1 Tijdsomkeer symmetrie in de kwantummechanica

De kwantummechanica is een theorie waarin operatoren centraal staan. Ook tijdsomkeer symmetrie van een systeem zal beschreven worden door de overeenstemmende operator. In wat volgt zal voor specifieke gevallen deze operator onderzocht worden en in het bijzonder zijn mogelijke eigenwaarden. Twee soorten operatoren, vooral hun eigenschappen, zullen belangrijk zijn in deze uiteenzetting. Daarom worden ze hier alvast gedefiniëerd en wat eigenschappen gegeven. Een deel van dit deze uiteenzetting is gebaseerd op een stuk uit *Quantum Signatures of Chaos* van Prof. Dr. Fritz Haake.

Unitaire operatoren in de kwantummechanica zijn operatoren die voldoen aan volgende definitie:

$$UU^\dagger = U^\dagger U = I, \quad (2.3)$$

wat volgende veelgebruikte eigenschappen als onmiddellijk gevolg heeft:

$$\langle Ux|Uy \rangle = \langle x|y \rangle, \quad (2.4)$$

$$U^\dagger = U^{-1} \Rightarrow KU^T = U^{-1}, \quad (2.5)$$

met K de toevoegingsoperator².

Anti-unitaire operatoren in de kwantummechanica zijn operatoren die voldoen aan volgende definitie:

$$UU^\dagger = U^\dagger U = I, \quad (2.6)$$

waarbij bovendien moet gelden dat

$$\langle Ux|Uy \rangle = \overline{\langle x|y \rangle} = \langle y|x \rangle. \quad (2.7)$$

Het kan makkelijk gezien worden dat de complex toegevoegde operator K een anti-unitaire operator is.

De uitbreiding van de tijdsomkeer operator in het klassieke geval naar het kwantummechanische regime begint uiteraard met het overstappen van de Hamilton-vergelijkingen naar de tijdsafhankelijke Schrödinger vergelijking:

$$i\hbar\dot{\psi}(x, t) = \hat{H}\psi(x, t). \quad (2.8)$$

Dezelfde definitie voor tijdsomkeer invariantie, in het meest algemene geval, blijft echter geldig: Voor elke $\psi(x, t)$, oplossing van de Schrödinger vergelijking, bestaat er een oplossing $\psi(x, -t)$, die in uniek verband met de oorspronkelijke oplossing staat. Wanneer deze eigenschap geldt, is de hamiltoniaan (en dus het fenomeen dat deze beschrijft) tijdsomkeer invariant.

Of in de vorm van commutatierelaties:

$$\boxed{\text{H tijdsomkeer invariant} \Leftrightarrow [H, T] = 0} \quad (2.9)$$

²Deze operator geeft van elke toestand zijn complex toegevoegde weer en heeft als eigenschappen: $K^2 = I$ en $K(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1^*\psi_1^* + c_2^*\psi_2^*$ (i.e. anti-lineariteit).

Het simpelste geval is een spin 0 deeltje dat een potentiaal reële $V(x)$ ondervindt. Hiervoor wordt de hamiltoniaan gegeven door

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x), \quad (2.10)$$

waarbij m de massa van het spinloos deeltje voorstelt. Wanneer de transformatie gegeven door (2.2) wordt uigevoerd op deze hamiltoniaan, wordt een oplossing $\psi(x)$ conventioneel als volgt getransformeerd:

$$\psi(x) \rightarrow \psi^*(x) = K\psi(x). \quad (2.11)$$

Omdat de Hamiltoniaan (2.10) van het spin 0 deeltje tijdsomkeer invariant is, volgt dat als $\psi(x, t)$ een oplossing van de Schrödinger vergelijking (2.8) is, $K\psi(x, -t)$ dit ook is.

De tijdsomkeer operator T is dus enkel in het spinloze geval gelijk aan de complex-toevoegings operator K waar K gedefiniëerd is ten opzicht van de positiebasis.

Een iets complexer geval is tijdsomkeer in systemen bestaande uit deeltjes met spin $1/2$ (met elektronen als type-voorbeeld).

Uit de overweging dat de tijdsomkeeroperator rekening moet houden met de expliciete factor i in de Schrödinger vergelijking en het feit dat de operator de modulus van de overlap tussen 2 golfvectors invariant moet laten, kan er de algemene voorwaarde gesteld worden dat de tijdsomkeer operator T anti-unitair moet zijn, i.e.

$$\langle Tx|Ty \rangle = \langle y|x \rangle. \quad (2.12)$$

Omdat uit de definitie van anti-unitaire operatoren volgt dat deze geschreven kunnen worden als de samenstelling van een unitaire en anti-unitaire operator, wordt de volgende vorm voorgesteld voorgesteld:

$$T = UK, \quad (2.13)$$

met K de reeds bekende complex toegevoegde operator (anti-unitair) en U een geschikte unitaire operator.

Een tweede assumptie die gemaakt kan worden is dat wanneer de tijdsomkeer operator twee keer na elkaar toegepast wordt op een toestand, de golffunctie van deze toestand hetzelfde moet zijn, op een fasefactor na. Dit is intuïtief aannemelijk mits de tijdsrichtingsomkeer twee keer na elkaar toepassen niets zou mogen veranderen aan de reële toestand. Deze overweging heeft een belangrijke consequentie als gevolg:

$$T^2 = \alpha, \quad |\alpha| = 1 \quad (2.14)$$

Gebruikmakend van de eigenschappen van unitaire en anti-unitaire operatoren en het feit dat $U^\dagger = \tilde{U}^*$, met \tilde{U} de getransponeerde (of U^T), volgt dat

$$\begin{aligned}
(UK)(UK) &= UU^*K^2 = UU^* = \alpha & (2.15) \\
\Leftrightarrow U^* &= \alpha U^{-1} \\
&= \alpha U^\dagger \\
&= \alpha \tilde{U}^* \\
&= \alpha(\alpha U^{-1})^T \\
&= \alpha(\alpha U^\dagger)^T \\
&= \alpha(\alpha \tilde{U}^*)^T \\
&= \alpha^2 U^* \Rightarrow \alpha = \pm 1, & (2.16)
\end{aligned}$$

zodat er voor de tijdsomkeer operator $T = KU$ twee fundamenteel verschillende gevallen onderscheiden kunnen worden, namelijk door (2.14) en (2.15) te vergelijken komt er $T^2 = \pm 1$.

Het geval $T^2 = 1$ werd reeds toegeschreven aan het systeem met spinloze deeltjes, hier was namelijk $T = K$, waarbij K^2 uiteraard $+1$ is. In wat volgt zal duidelijk worden dat voor systemen met spin $1/2$ deeltjes het andere geval zich zal voordoen, nl. $T^2 = -1$.

Om ook voor spin $1/2$ deeltjes een conventionele vorm van de tijdsomkeer operator T af te leiden, wordt vertrokken van het feit dat, voor J het totale draaiimpuls,

$$TJT^{-1} = -J \quad (2.17)$$

altijd moet gelden. Dit is intuïtief duidelijk door te beschouwen dat het totale draaiimpuls J de som is van enerzijds het orbitaal draaiimpuls $l = \vec{r} \times \vec{p}$ en anderzijds spin S , dewelke beide oneven zijn onder tijdsomkeer.

Verder wordt het geval beschouwd waarbij het ruimtelijk draaiimpuls niet aanwezig is en de spinrepresentatie van de operator gegeven wordt door $\hat{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$. Hier stellen de componenten van $\vec{\sigma}$ de paulimatrices σ_x, σ_y en σ_z voor.

Gebruik makend van de eis dat T moet voldoen aan $TST^{-1} = -S$ en dat S kan geschreven worden als lineaire combinatie van de paulimatrices, volgt dat $T = UK$, waarbij U wordt bepaald door de eis dat hij moet voldoen aan de volgende relaties:

$$\begin{aligned}
T\sigma_x T^{-1} &= UK\sigma_x(UK)^{-1} = U\sigma_x U^{-1} = -\sigma_x \\
T\sigma_y T^{-1} &= UK\sigma_y(UK)^{-1} = -U\sigma_y U^{-1} = -\sigma_y \\
T\sigma_z T^{-1} &= UK\sigma_z(UK)^{-1} = U\sigma_z U^{-1} = -\sigma_z.
\end{aligned}$$

Dit wil zeggen dat U moet commuteren met σ_y maar moet anti-commuteren met σ_x en σ_z . Door het feit dat elke 2×2 matrix, dus ook U , geschreven kan worden als een lineaire combinatie van Pauli matrices ($U = \alpha\sigma_x + \beta\sigma_y + \gamma\sigma_z + \delta$), kan er, rekening houdend met voorgaande commutatierelaties, een algemene vorm voor de unitaire matrix U gevonden worden, nl. $U = i\sigma_y$. Dit leidt op zijn beurt dan weer tot de algemene vorm van de tijdsomkeer operator $T = UK$:

$$\boxed{T = i\sigma_y K} \quad (2.18)$$

Dit is de conventionele uitdrukking voor de tijdsomkeer operator T , inwerkend op een spin $1/2$ deeltje.

Nu is het makkelijk na te gaan dat, zoals hierboven reeds werd aangegeven dat de operator

T^2 inderdaad gelijk is aan de negatieve eenheid, in tegenstelling tot het spinloze geval. Hierdoor is er een fundamenteel verschil in tijdsomkeer opgetreden afhankelijk van de spin van het deeltje dat beschouwd wordt. Om systemen te beschouwen met meerdere, zeg N , deeltjes met spin $1/2$, is het voorgaande makkelijk uitbreidbaar door voor de matrix U_{tot} het product te nemen van de afzonderlijke matrices U_i van elk deeltje. Door $T = i\sigma_{y_1} i\sigma_{y_2} \dots i\sigma_{y_N} K$ te beschouwen volgt al snel dat

$$T^2 = \begin{cases} +1 & \text{als } N \text{ even} \\ -1 & \text{als } N \text{ oneven.} \end{cases}$$

Dit fundamenteel verschil zal tot grote gevolgen leiden en van groot belang zijn voor onderstaande principes. Uiteraard zal er steeds gekeken worden naar het $T^2 = -1$ geval, omdat de geleiding in materialen door elektronen (en holten) gebeurt, beide spin $1/2$ deeltjes, en de gebruikte modellen steeds uitgaan van niet integreerbare deeltjes. De gevonden relatie is dus van essentieel belang voor de beschrijving van topologische isolatoren.

2.1.2 Kramers' theorema

Hamiltonianen die tijdsomkeer invariant zijn voldoen aan $[H, T] = 0$, of anders gezegd, H en T commuteren. Het volgt uit basis kwantummechanica dat er voor beide operatoren een gemeenschappelijke set van basisfuncties in de Hilbertruimte kan gekozen worden. Hieruit volgt dat *als* ψ een eigentoestand is van de hamiltoniaan operator met eigenwaarde E , *dan* is $T\psi$ ook een eigentoestand met dezelfde eigenwaarde E . De centrale vraag is nu, of dat deze ontaarde toestanden, ψ en $T\psi$ dezelfde toestanden of verschillende toestanden voorstellen.

Om dit te onderzoeken wordt gekeken naar het scalaire product van ψ en $T\psi$:

$$\begin{aligned} \langle \psi | T\psi \rangle &= \langle T\psi | T^2\psi \rangle^* \\ &= -\langle T\psi | \psi \rangle^* \\ &= -\langle \psi | T\psi \rangle, \end{aligned}$$

waarbij de eerste gelijkheid volgt uit eigenschap (2.7). Bij de tweede gelijkheid werd expliciet gebruik gemaakt van het feit dat $T^2 = -1$, hetgeen geldt voor een systeem bestaande uit een oneven aantal spin $1/2$ deeltjes³.

Uit het voorgaande volgt meteen dat

$$\boxed{\langle \psi | T\psi \rangle = 0}. \quad (2.19)$$

Dit is Kramer's Theorema.

Het stelt dat voor elk systeem met een oneven aantal spin $1/2$ deeltjes, waarvan de hamiltoniaan commuteert met de tijdsomkeer operator, *elke* eigentoestand dubbel ontaard is. Deze belangrijke stelling zal verderop gebruikt worden om voor een systeem het minimum aantal elektronische banden te bepalen.

2.1.3 Tijdsomkeersymmetrie in kristallen

Topologische isolatie, en geleiding van elektronen in het algemeen, wordt in het overgrote deel onderzocht in materialen met kristalstructuur (metalen of halfgeleiders). Daarom is

³Het kan bewezen worden dat in het geval waarbij $T^2 = +1$, een systeem bestaande uit een even aantal spin $1/2$ deeltjes, geldt dat $\langle \psi | T\psi \rangle \neq 0$ en dat beide toestanden gelijk zijn op fase na.

het van belang om een kwantummechanische beschrijving van elektronen in een kristalstructuur toe te lichten. Eens deze gekend is, kunnen de bovenstaande principes hierop toegepast worden.

Om elektronen in een kristal te beschrijven wordt de kristalpotentiaal beschouwd als infinitesimale storing op de ongestoorde hamiltoniaan van een vrij elektron. Door zowel de kristalpotentiaal $V(x)$ als de golffunctie $\psi(x)$ fourier te transformeren, wordt de Schrödinger vergelijking omgezet in een set van algebraïsche vergelijkingen. Deze set vergelijkingen, opgelost naar de fourier-coëfficiënten van ψ geven dan aanleiding tot een algemene vorm van golffuncties die elektronen in een kristalpotentiaal beschrijven, de zogenaamde *Bloch Functies*:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r}), \quad u_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} C_{\vec{k}-\vec{G}} e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}}, \quad (2.20)$$

waarbij de functies $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ de periodiciteit van het kristalrooster hebben en $C_{\vec{k}-\vec{G}}$ de fouriercoëfficiënten van u zijn. Algemeen vallen alle functies die het product zijn van een periodische functie en een vlakke golf (e-macht van de vorm $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$) onder de noemer Bloch Functies.

Door de tijdsafhankelijke Schrödinger vergelijking, $\hat{H}\psi_{\vec{k}} = E\psi_{\vec{k}}$, links te vermenigvuldigen met $e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}$, wordt een Schrödinger vergelijking bekomen voor de periodische functie $u_{\vec{k}}(\vec{r})$. Deze heeft echter een hamiltoniaan van een nieuwe vorm:

$$\hat{H}(\vec{k}) = e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \hat{H} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}, \quad (2.21)$$

zodat de nieuwe Schrö vergelijking

$$\hat{H}(\vec{k}) u_{\vec{k}}(\vec{r}) = E u_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.22)$$

wordt. De nieuwe hamiltoniaan wordt ook de Blochhamiltoniaan genoemd.

Het is nu interessant om te onderzoeken hoe de algemene tijdsomkeer operator $T = i\sigma_y K$ inwerkt op deze nieuwe hamiltoniaan. Een korte berekening levert

$$\begin{aligned} TH(\vec{k})T^{-1} &= i\sigma_y K (e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} H e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}) (-i\sigma_y K) \\ &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \sigma_y H^* \sigma_y e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \\ &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} T H T^{-1} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \\ &= H(-\vec{k}), \end{aligned} \quad (2.23)$$

waarbij de laatste gelijkheid volgt uit het vergelijken van de uitdrukking met (2.21) en de eis dat de hamiltoniaan commuteert met de tijdsinversie operator⁴.

Dit resultaat is van groot belang, het wil zeggen dat elke tijdsomkeer invariante hamiltoniaan die elektronen in een kristal beschrijft, twee ontaarde toestanden heeft met kristalimpuls resp. \vec{k} en $-\vec{k}$.

Dus volgt:

$$\begin{aligned} \hat{H}(\vec{k})|u_{\vec{k}}\rangle &= E_{\vec{k}}|u_{\vec{k}}\rangle \\ \hat{H}(-\vec{k})T|u_{\vec{k}}\rangle &= E_{\vec{k}}T|u_{\vec{k}}\rangle \end{aligned}$$

⁴Als H en T commuteren dan geldt dat $[H, T] = 0$ waaruit volgt dat $THT^{-1} = H$.

waardoor onmiddellijk geldt

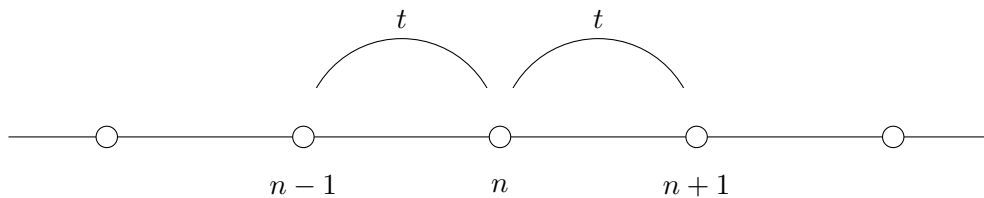
$$T|u_{\vec{k}}\rangle \propto |u_{-\vec{k}}\rangle \text{ en} \\ E_{\vec{k}} = E_{-\vec{k}}.$$

Wanneer deze situatie dan onderzocht wordt in tijdsomkeerinvariante punten, nl. waarvoor geldt dat $T|u_{\vec{k}}\rangle \propto |u_{\vec{k}}\rangle$, dan kan er onderscheidt gemaakt worden tussen verschillende systemen. Voor systemen met spinloze deeltjes of een even aantal spin 1/2 deeltjes, zal T^2 gelijk zijn aan 1. In dit geval, zoals eerder vermeld, zullen beide toestand gelijk zijn. Wanneer echter een systeem met een oneven aantal spin 1/2 deeltjes, in dit geval elektronen, beschouwd worden, zal er Kramers' ontarding optreden, en zullen de ontarnde toestand dus verschillend zijn.

2.1.4 Creatie- en annihilatieoperatoren

Als laatste rekentechniek zullen creatie- en annihilatieoperatoren onder de loep worden genomen. Het is als het ware een moderne aanpak van kwantummechanische berekeningen en wordt overal in de fysica gebruikt. Deze operatoren komen voort uit een theorie die *tweede kwantisatie* wordt genoemd. Een uitgebreide uiteenzetting over tweede kwantisatie zou hier niet op zijn plaats zijn. De operatoren worden dusdanig geïntroduceerd aan de hand van een voorbeeld dat meteen handig zal zijn voor verdere berekeningen.

Beschouw de 1-dimensionale keten van identieke atomen met roosterparameter a zoals weergegeven op onderstaande figuur 2.1:



Figuur 2.1: Een schematische voorstelling van een lineaire keten van gelijke atomen. De rooster parameter is a en de bindingsterkte t tussen de atomen karakteriseert de overgangswaarschijnlijkheid.

Stel dat elke van deze atomen een valentie elektron kan huisvesten. De valentie elektronen van de verschillende atomen kunnen, omwille van de binding tussen de atomen, vrij bewegen van atoom naar atoom. Dit proces wordt *hopping* genoemd. Bijvoorbeeld: Een valentie elektron kan van atoom n overgaan naar atoom $n + 1$, als dit atoom een vrije plaats heeft op dit valentie energieniveau. Deze overgang wordt gekarakteriseerd door de parameter t die optreedt als overgangsamplitude. Deze hangt deels af van de sterkte van de bindingen tussen de desbetreffende atomen. We kunnen dit proces beschrijven door gebruik te maken van operatoren die duiden op het 'verschijnen' (creatie) van een elektron bij atoom $n+1$ en het 'verdwijnen' (annihilatie) van een elektron bij atoom n .

De hopping beschreven in het voorbeeld kan dus geschreven worden als

$$n \longrightarrow n + 1 \Leftrightarrow t c_{n+1}^\dagger c_n \text{ ,} \quad (2.24)$$

waarbij c_{n+1}^\dagger de creatie operator en c_n de annihilatie operator wordt genoemd.

Deze operatoren bieden de mogelijkheid om voor een lineaire keten met N atomen, zoals hierboven beschreven, de totale hamiltoniaan in een eenvoudige vorm te schrijven namelijk:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N t c_{i+1}^\dagger c_i + t c_i^\dagger c_{i+1} \text{ ,} \quad (2.25)$$

waarbij de tweede term in de som de hermitisch toegevoegde is van de eerste. Deze term stelt de tegenovergestelde hopping voor. Een atoom n kan een elektron *ontvangen* van atoom $n-1$, weergegeven door $c_n^\dagger c_{n-1}$ maar kan ook een elektron *afgeven* aan atoom $n-1$, weergegeven door $c_{n-1}^\dagger c_n$.

Verder worden enkele veelgebruikte eigenschappen meegegeven:

- De uitbreiding van bovenstaande hamiltoniaan naar een systeem met meerdere kwantumgetallen (bv. α, β en k) ligt voor de hand:

$$\hat{H} = \sum_{k,\alpha,\beta} c_{k\alpha}^\dagger c_{k\beta} h_{\alpha\beta}(\vec{r}) \text{ ,} \quad (2.26)$$

waarbij gesommeerd wordt over alle kwantumgetallen en de overgangsamplitude $h_{\alpha\beta}(\vec{r})$ nu geen constante meer is.

- Wanneer de vacuümtoestand wordt voorgesteld door de ket $|0\rangle$, dan werken, in het algemeen, resp. de creatie- en annihilatieoperator als volgt in op deze speciale toestand:

$$c_i^\dagger |0\rangle = |i\rangle \text{ en } c_i |0\rangle = 0 \text{ .} \quad (2.27)$$

- De anti-commutator van creatie- en annihilatieoperator kan geschreven worden als

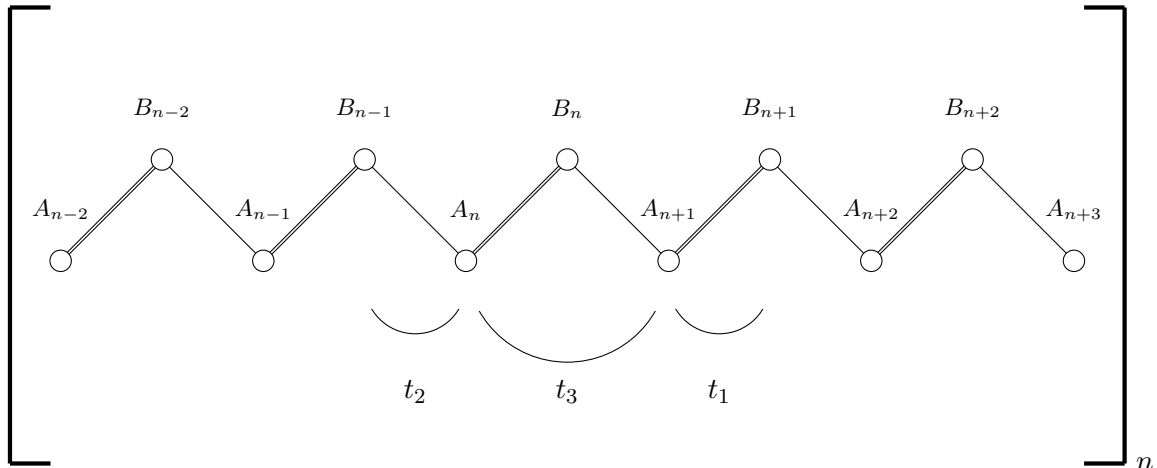
$$\{c_{i\alpha\beta\gamma\dots}, c_{i'\alpha'\beta'\gamma'\dots}^\dagger\} = \delta_{ii'} \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\beta\beta'} \delta_{\gamma\gamma'} \dots \text{ ,} \quad (2.28)$$

waarbij de indices alle kwantumgetallen voorstellen.

Deze rekentechnieken zullen in de volgende paragrafen gebruikt worden om voor verschillende toepassingen bepaalde berekeningen uit te voeren.

2.2 1D Toepassing: Polyacetyleen keten

In wat volgt zullen bovenstaande principes en technieken toegepast worden op een één-dimensionale keten van atomen, polyacetyleen. Deze molecule is een keten van koolstofatomen die onderling, lineair gebonden zijn via sp^2 bindingen met een afwisselende bindingssterkte. Elk koolstof atoom draagt 1 relevant elektron bij dat zich in de p_z -orbitaal bevindt. Aan elk koolstofatoom is tevens een waterstof atoom gebonden via een enkelvoudige binding, deze wordt echter buiten beschouwing gehouden. De keten die bestudeerd wordt is te zien in onderstaande figuur.



Figuur 2.2: Een schematische voorstelling van polyacetyleen waarbij de waterstof atomen zijn weggelaten. De atomen worden aangeduid met A_n en B_n waarmee duidelijk gemaakt wordt dat deze niet dezelfde omgeving hebben en dus als verschillend beschouwd worden. t_1 en t_2 stellen resp. de sterkte van de dubbele- en enkelvoudige binding voor. t_3 is een maat voor de binding tussen gelijkwaardige atomen.

Merk op dat om aan zijn definitie te voldoen, de eenheidscel twee opeenvolgende atomen moet bevatten. Dit is zo omdat de binding tussen de atomen, afwisselend van verschillende sterkte is.

Verder zal er onderscheidt gemaakt worden tussen enerzijds *open* en *gesloten* ketens, waarmee bedoeld wordt dat er onderscheidt wordt gemaakt tussen eindige ketens, waarbij het aantal atomen, N , eindig is, en oneindige ketens. Bij deze laatste wordt het aantal atomen oneindig gesteld, dit wordt gemodelleerd door gepaste randvoorwaarden op te leggen.

Door de totale energie te bepalen van deze ketens, en deze in functie van hun relatieve bindingssterkte, zal een eerste indicatie van topologische toestanden van het kristal zich manifesteren.

2.2.1 Peierls instabiliteit

Eerst wordt aangetoond dat het beschreven model van de 1-dimensionale keten realistisch is, in het bijzonder zal bewezen worden dat een dergelijk systeem effectief streeft naar een toestand waarbij de opeenvolgende bindingen tussen naburige atomen verschillend zijn.

Er wordt beschouwd dat elke atoom één ladingsdrager bijdraagt aan de relevante band, dit

komt overeen met bijvoorbeeld een enkel elektron in de p_z -orbitaal van koolstof atomen, wanneer spin niet in acht wordt genomen. In eerste instante wordt verwacht dat door de halve bandvulling, metallische geleiding zou optreden. Echter, een ééndimensionaal systeem met halve bandvulling kan altijd in energie verlaagd worden door een periodische storing op te leggen en hierdoor de symmetrie te verlagen. Hierdoor zal de éénheidscel verdubbelen in grootte en twee atomen bevatten. Dit zorgt voor twee toestanden per orbitaal waardoor de relevante band nu exact gevuld is.

Het principe dat dit proces beschrijft is Peierls' Theorema. Hieruit volgt dat een ééndimensionaal systeem, bestaande uit gelijk gespaciëerde, gebonden atomen, *onstabiel* is. Om deze instabiliteit op te heffen zal het systeem streven naar een toestand met ongelijke spaciëring van de atomen, wat verwezenlijkt wordt door ongelijke bindingen tussen opeenvolgende atomen.

Beschouw opnieuw de ééndimensionale keten uit sectie 2.1.4, figuur 2.1, waarbij de bindingen tussen de atomen niet rigide zijn. Dit wil zeggen dat de atomen zich op een afstand α t.o.v. de evenwichtspositie kunnen bevinden. Deze grootte is dynamisch en wanneer ze klein is t.o.v. de interatomaire afstand kan de harmonische benadering⁵ gebruikt worden. Hierdoor zal de totale energie van de keten bepaald worden door een evenwicht tussen twee grootheden die afhankelijk zijn van de verplaatsing α .

Eenzijds is er een energiekost die het gevolg is van de elastische (Hooke) energie

$$\begin{aligned} E_{Hooke} &= \frac{K}{2} \sum_i^N [(u_{i+1} - u_i)^2] \\ &= \frac{K}{2} N(2\alpha a)^2 \\ &= 2KN\alpha^2, \end{aligned}$$

waarbij N het aantal atomen in de keten is (en tevens het aantal éénheidscellen), K een krachtsconstante en $a = 1$ wordt gekozen als evenwichtsafstand tussen de atomen.

Anderzijds zijn de overgangswaarschijnlijkheden, aangeduid met t , afhankelijk van de afstand tussen de atomen. Wanneer twee naburige atomen zich dichter bij elkaar bevinden, zal de overgangswaarschijnlijkheid tussen deze atomen groter zijn dan wanneer ze verder van elkaar verwijderd zouden zijn. Atomaire orbitalen nemen exponentieel af en omdat de hoppingwaarschijnlijkheid samenhangt met de overlap tussen twee verschillende orbitalen, wordt er ook een exponentieel gedrag verwacht voor de overgangswaarschijnlijkheid t , uitgedrukt door

$$t \longrightarrow te^{(-1)^i \alpha}, \quad (2.29)$$

waarbij i een atoomindex is. De factor $(-1)^i$ zorgt ervoor dat bij inkrimping de hoppingamplitude verlaagd wordt ($-$) en bij uitrekking deze amplitude verhoogd wordt ($+$). Naar analogie van sectie 2.1.4, wordt de totale hamiltoniaan geschreven in functie van creatie- en annihilatieoperatoren:

⁵Bij de harmonische benadering wordt de interatomaire potentiaal tot op 2^{de} orde benaderd. In de meeste gevallen wordt zelfs enkel de 2^{de} -orde term behouden zodat de potentiaal de vorm krijgt van een harmonische oscillator, kwadratisch in de uitwijking.

$$\hat{H}_{tot} = \sum_{i=1}^N te^{(-1)^i \alpha} c_{i+1}^\dagger c_i + te^{(-1)^i \alpha} c_i^\dagger c_{i+1} + 2NK\alpha^2 . \quad (2.30)$$

Omwille van de harmonische benadering kan de exponentiële, $te^{(-1)^i \alpha}$, ontwikkeld worden tot op 2^{de} orde in α , rond 0:

$$te^{(-1)^i \alpha} \approx t[1 + \alpha(-1)^i], \quad \text{voor elke } i. \quad (2.31)$$

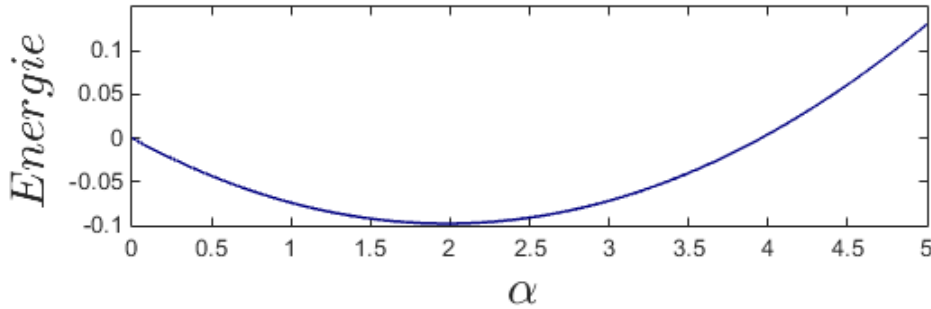
Ingevuld in uitdrukking (2.30) wordt de totale hamiltoniaan

$$\begin{aligned} \hat{H}_{tot} &= \sum_{i=1}^N tc_{i+1}^\dagger c_i + tc_i^\dagger c_{i+1} + \sum_{i=1}^N t\alpha(-1)^i c_{i+1}^\dagger c_i + t\alpha(-1)^i c_i^\dagger c_{i+1} + 2NK\alpha^2 \quad (2.32) \\ &= \hat{H}_0 + \hat{H}_d(\alpha) . \quad (2.33) \end{aligned}$$

Hierbij kan de eerste term, \hat{H}_0 , herkend worden als de hamiltoniaan van de één-dimensionale keten met rigide bindingen. De tweede term, $\hat{H}_d(\alpha)$, is a.h.w. een extra energie term die tevoorschijn komt wanneer afstand wordt gedaan van de aanname dat de bindingen rigide zijn en dus de relatieve posities van de atomen dynamisch zijn. Deze term is tevens afhankelijk van α .

Volgens Peierls' theorema is de rigide keten instabiel en zal het systeem streven naar een stabiele toestand. Er zal een competitie optreden tussen de elektronische energie verlagen en elastische energie verhogen. In het geval van de beschouwde keten kan dit eenvoudig wiskundig vertaald worden in het feit dat de extra energie term, \hat{H}_d , *negatief* moet zijn om de totale energie van het systeem te verlagen. Mits deze term enkel als variabele α heeft, zal het er dus op neerkomen α te optimaliseren zodat de totale energie minimaal is. Deze optimale waarde bepaalt dan de relatie tussen de verschillende overgangswaarschijnelijheden t van de opeenvolgende bindingen volgens (2.29).

De totale hamiltoniaan \hat{H}_{tot} van uitdrukking (2.33) kan gediagonaliseerd worden om zo een uitdrukking te bekomen voor het geval waarbij het aantal eenheidscellen eindig is. Deze energie kan geëxtremaliseerd worden als functie van α . Wanneer de energie i.f.v. α geplotted wordt, kan er echter ook eenvoudig gezien worden dat de energie een minimale waarde bereikt voor een waarde van α verschillend van 0.



Figuur 2.3: Een grafiek waarop de extra energie voor een keten van 20 éénheidscellen in functie van de verplaatsing t.o.v. de evenwichtspositie van de atomen is weergegeven.

Uit de grafiek is duidelijk zichtbaar dat α een negatief minimum bereikt rond de waarde 2. Uit relatie (2.29) kan dan geconcludeert worden dat de overgangswaarschijnlijkheden *niet* identiek zijn voor elk paar van atomen. Er zal dus onderscheidt gemaakt moeten worden tussen twee gevallen:

$$t \longrightarrow te^{-\alpha} \equiv t_1 \quad (2.34)$$

$$t \longrightarrow te^{+\alpha} \equiv t_2 \quad (2.35)$$

zoals vooraf werd gemodeleerd en te zien op figuur (2.2).

Het is ook mogelijk om een analytische uitdrukking voor α te vinden. Hiervoor wordt vergelijking (2.32) herschreven als

$$\hat{H}_{tot} = \sum_{i=1}^N \left[t[1 + (-1)^i \alpha][c_i^\dagger c_{i+1} + c_{i+1}^\dagger c_i] \right] + 2NK\alpha^2. \quad (2.36)$$

Wanneer nu in rekening wordt gebracht dat de symmetrie van de keten gebroken wordt, zullen er twee atomen per éénheidscel zijn. Hierdoor kunnen er nieuwe creatie- en annihilatieoperatoren geïntroduceerd worden, waarbij er onderscheid wordt gemaakt tussen de twee niet equivalente atomen in de keten. Deze operatoren worden genoteerd als a_i^\dagger en b_i^\dagger (en de overeenkomstige annihilatieoperatoren). Zo staat $a_i^\dagger b_i$ voor hopping binnen 1 éénheidscel en $a_{i+1}^\dagger b_i$ voor hopping tussen twee verschillende éénheidscellen.

Op deze manier kan de voorgaande uitdrukking voor de hamiltoniaan herschreven worden als een som over $N/2$ éénheidscellen:

$$\hat{H}_{tot} = t \sum_{m=1}^{N/2} \left[(1 + \alpha)[b_m^\dagger a_m + a_m^\dagger b_m] + (1 - \alpha)[b_m^\dagger a_{m+1} + a_{m+1}^\dagger b_m] \right] + 2NK\alpha^2. \quad (2.37)$$

Deze uitdrukking wordt Fourier getransformeerd naar de kristalimpuls k . Zo'n transformatie van de hamiltoniaan wordt later in meer detail besproken waarbij verwezen wordt naar Appendix I, waar een soortgelijke transformatie volledig is uitgewerkt. Voor nu wordt enkel het resultaat gegeven. Dit resultaat is een uitdrukking van de hamiltoniaan in matrixvorm:

$$\hat{H}_{tot} = -t \sum_k \begin{pmatrix} a_k^\dagger & b_k^\dagger \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & (1 + \alpha) + (1 - \alpha)e^{+2ik} \\ (1 + \alpha) + (1 - \alpha)e^{-2ik} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix} + 2KN\alpha^2. \quad (2.38)$$

Nu de hamiltoniaan in matrixvorm staat, kan deze eenvoudig gediagonaliseerd worden door zo de energie eigenwaarden van het systeem te bepalen in functie van α . Door de bovenstaande matrix te diagonaliseren en daarna te sommeren over alle $N/2$ éénheidscellen wordt volgende uitdrukking verkregen voor de totale energie van het systeem:

$$E = -2 \sum_{k \text{ in BZ}} \left[2t[1 + (\alpha^2 - 1) \sin^2(k)]^{\frac{1}{2}} \right] + 2KN\alpha^2 \quad (2.39)$$

$$= -\frac{N}{\pi} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} 2t[1 + (\alpha^2 - 1) \sin^2(k)]^{\frac{1}{2}} dk + 2KN\alpha^2 \quad (2.40)$$

$$= 2KN\alpha^2 - N \frac{2t}{\pi} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} [1 - (1 - \alpha^2) \sin^2(k)]^{\frac{1}{2}} dk. \quad (2.41)$$

Hierbij wordt de integraal genomen over het interval $[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$ omdat het oorspronkelijk aantal éénheidscellen gehalveerd is tot $N/2$ endus de Brioullin zone gereduceerd wordt. Omdat $\alpha < 1$, is $1 - \alpha^2 > 0$ en krijgt de integraal een speciale vorm.

In deze vorm is bekomen integraal een voorbeeld van een complete elliptische integraal van de tweede soort. Deze integralen zijn goed gedocumenteerd en een Taylorbenadering kan eenvoudig opgezocht worden voor deze specifieke vorm van het integrandum:

$$\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} [1 - (1 - \alpha^2) \sin^2(k)]^{\frac{1}{2}} dk \simeq 2 + (\Theta - \Lambda \ln(\alpha^2))\alpha^2 + \dots, \quad (2.42)$$

waarbij Θ en Λ constanten zijn gegeven door $\Theta = 2 \ln(2) - \frac{1}{2}$ en $\Lambda = \frac{1}{2}$. Deze benadering ingevuld in uitdrukking (2.41) geeft na enig herschikken een uitdrukking voor de totale energie van het systeem.

$$E(\alpha) = 2NK\alpha^2 - N\frac{1}{\pi} [4t + 2t[\Theta - \Lambda \ln(\alpha^2)]]\alpha^2. \quad (2.43)$$

Om de optimale α te vinden die tot minimale energie leidt, wordt bovenstaande uitdrukking afgeleid naar α en gelijk gesteld aan nul. Uit de eis dat

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha} = 0, \quad (2.44)$$

volgt dan

$$\begin{aligned} \ln(\alpha^2) &= \frac{\Theta}{\Lambda} - 1 - \frac{K\pi}{t\Lambda} \text{ of} \\ \alpha^2 &= \exp\left[\frac{\Theta}{\Lambda} - 1 - \frac{K\pi}{t\Lambda}\right]. \end{aligned} \quad (2.45)$$

Rekening houdend met de waarden van Θ en Λ kan geconcludeerd worden dan de optimale waarde van α niet nul is en dus dezelfde conclusie getrokken kan worden in verband de afwisselende bindingssterkte t_1 en t_2 , wat volgt uit (2.34) en (2.35).

2.2.2 De eindige keten

Beschouw een eindige keten met N atomen, $\{A_1, B_1, A_2, B_2, \dots, A_N, B_N\}$. Hierbij worden de bindingen tussen atomen A_i en B_i met de parameter t_1 aangeduid en de bindingen tussen atomen B_i en A_{i+1} met de parameter t_2 . Er worden in eerste instantie enkel bindingen beschouwd tussen naburige atomen. Verder zullen ook de binding tussen atomen A_i en A_{i+1} (analoog voor de B-atomen) meegenomen worden. Deze bindingen worden gekarakteriseerd door t_3 .

De totale hamiltoniaan van het eindig systeem wordt eenvoudig beschreven door gebruik te maken van de creatie- en annihilatieoperatoren:

$$\hat{H} = \sum_{n=2}^N t_1 c_{B_n}^\dagger c_{A_n} + t_2 c_{A_{n+1}}^\dagger c_{B_n} + h.c. \quad (2.46)$$

waarbij rekening werd gehouden met het verschil in overgangsamplituden t_1 en t_2 . De laatste term, h.c., staat voor de *hermitian conjugate* en is de complex toegevoegde van de eerste twee termen. Deze dient ervoor om ook hopping in de tegenovergestelde richting toe te laten. De eerste en de tweede term zijn verschillend in het opzicht dat de eerst *intracell hopping* beschrijft (hopping binnen de eenheidscel) en de tweede *intercell hopping* beschrijft (hopping tussen de eenheidscellen in).

Deze notatie van de hamiltoniaan laat ook een matrixnotatie toe die uiterst handig blijkt te zijn voor computationele berekeningen omtrent het vinden van de energie-eigenwaarden. In het geval dat hier beschouwd wordt, kan de hamiltoniaan in matrix vorm als volgt geschreven worden:

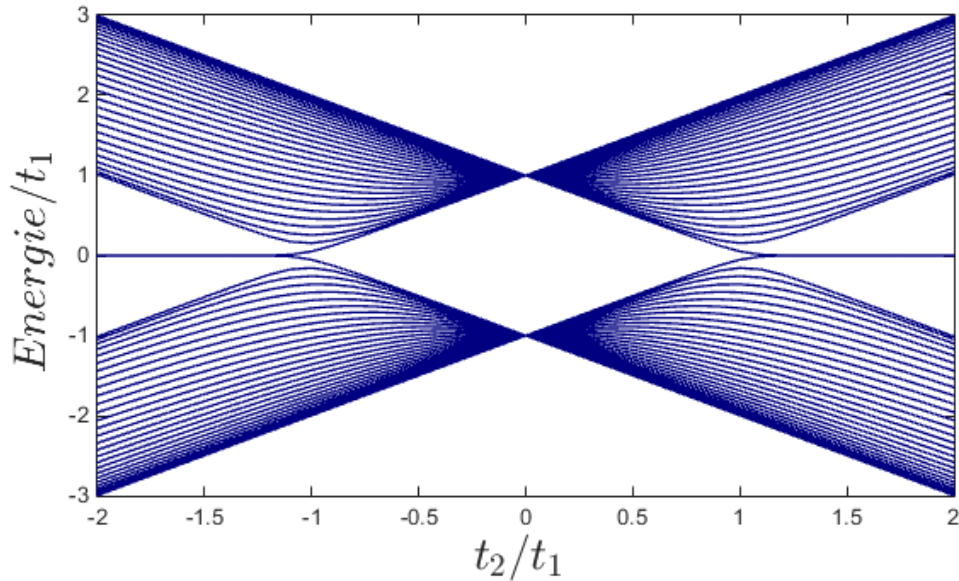
$$\hat{H} = \begin{pmatrix} c_{A_1}^\dagger & c_{B_1}^\dagger & \cdots & c_{A_N}^\dagger & c_{B_N}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & t_2 & \cdots & 0 \\ t_2 & 0 & t_1 & \vdots \\ & t_1 & 0 & t_2 & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & t_2 \\ 0 & 0 & \cdots & t_2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{A_1} \\ c_{B_1} \\ \vdots \\ c_{A_N} \\ c_{B_N} \end{pmatrix} \quad (2.47)$$

Hierbij is de matrix die de overgangsamplitudes uitdrukt, T_{nm} , een tridiagonale matrix met op de nevendagonalen afwisselend t_1 en t_2 . De diagonaal elementen zouden overeen komen met de termen $c_{A_i}^\dagger c_{A_i}$ of $c_{B_i}^\dagger c_{B_i}$. Dit komt overeen met de bindingsenergie van de valentie elektronen aan de atomen. Deze wordt gelijk gesteld voor alle atomen A en B en arbitrair op nul gekozen. Het is belangrijk deze symmetrie goed voor ogen te houden omdat deze zal zorgen voor de effecten die topologische isolatoren eigen zijn. Hier wordt later nog verder op ingegaan.

Het is in deze vorm triviaal om de niet naburige bindingen in rekening te brengen door niet enkel de nevendagonalen niet nul te stellen maar ook diegenen daarnaast te voorzien van een overgangsamplitude.

Nu wordt er onderzocht hoe de relatieve bindingssterktes t_1 en t_2 invloed hebben op de totale energieverdeling over de keten. Hiervoor wordt een keten van 60 atomen beschouwd. De hamiltoniaan in matrixvorm (2.47) leent zich uitstekend om de energie eigenwaarden numeriek te bepalen. De matrix T_{nm} wordt gediagonaliseerd en hieruit worden de eigenvectoren met overeenstemmende eigenwaarden bekomen. Wanneer de bindingsparameter t_1 constant gehouden wordt en t_2 variëren, kan E/t_1 geplot worden in functie van t_2 .

Onderstaande grafiek is het resultaat van deze berekeningen:



Figuur 2.4: Grafiek van de $E - t_2$ voorstelling van de eindige keten met $N = 60$ atomen. Elke curve hoort bij een verschillende t_2 waarde en stelt dus een andere keten voor. t_2/t_1 gaat van -2 tot $+2$ met stapgrootte 0.1 .

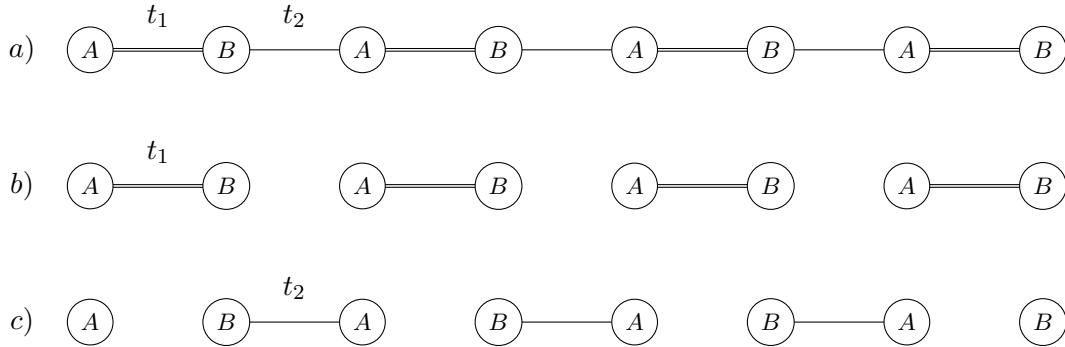
Op deze grafiek stelt elke curve een andere polyacetyleen-keten voor waarbij de relatieve bindingssterkte t_2/t_1 telkens een verschillende waarde heeft.

Vooreerst kan er uit de grafiek geconcludeert worden dat er verschillende gebieden kunnen onderscheiden worden, namelijk: het gebied $t_2/t_1 =] - \infty, -1[\cap [1, \infty[$ enerzijds en $t_2/t_1 =] - 1, 1[$ anderzijds. Het verschil tussen beide gebieden is dat in het eerste gebied zich een ontaard energieniveau ($E = 0$) bevindt terwijl dit in het andere gebied niet het geval is. Deze ontaarding doet zich voor vanaf de randen van beide gebieden, nl. bij $t_2/t_1 = \pm 1$. Wat het verschil tussen beide gebieden fysisch wil zeggen is dat de enkelvoudige en dubbele bindingen van plaats verwisseld worden, wat in de limiet gevallen fundamentele gevolgen heeft.

Deze limiet gevallen, sterke koppeling en zwakke koppeling, geven aanleiding wat men resp. het topologisch en triviaal gebied noemt. Ze worden hieronder beschreven aan de hand van onderstaande figuur.

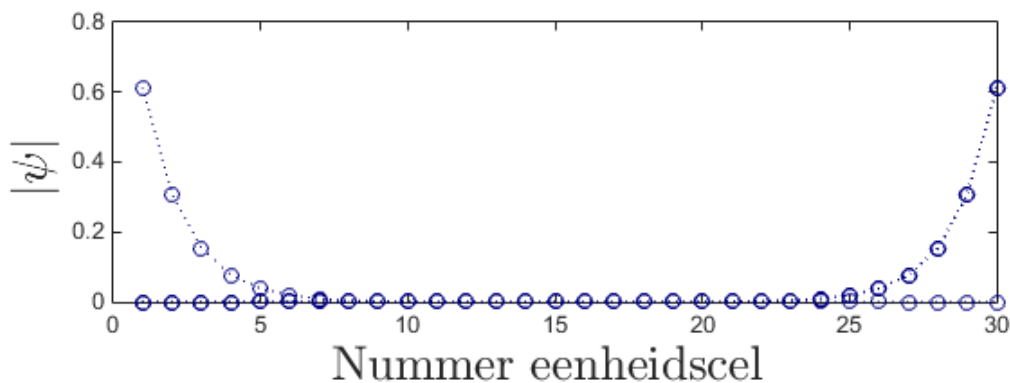
- Zwakke koppeling verwijst naar de limiet waarin $|t_1| \gg |t_2|$ of $t_2 \rightarrow 0$. Zoals te zien op (b) van figuur 2.5, vormen er zich dan $N/2$ aparte moleculen die uit twee atomen bestaan. Deze ondervinden onderling geen interactie meer en kunnen als vrije dimere beschouwd worden. Wanneer 2 atomen in de grondtoestand bij elkaar worden gebracht en een binding ondergaan, zal het energieniveau symmetrisch opsplitsen rond de grondtoestandsenergie van beide atomen. Dit is duidelijk zichtbaar op bovenstaande grafiek bij het punt $t_2/t_1 = 0$. Deze fase van de keten wordt de *triviale fase* genoemd.

- Sterke koppeling verwijst naar de limiet waarin $|t_1| \ll |t_2|$ of $t_1 \rightarrow 0$. Dit is te zien op (c) van figuur 2.5. Zoals bij de zwakke koppelingslimiet vormen er zich aparte moleculen. In deze limiet blijven er echter twee ongebonden atomen over aan de randen van de keten. Deze atomen ondervinden geen interactie van de andere moleculen of van elkaar en zijn dus vrije atomen. Ze bezitten beide de grondtoestandsenergie en omdat deze gelijk is gekozen voor beide atomen zal deze toestand dus ontaard zijn. Dit is wat er te zien is aan de uiteinden van bovenstaande grafiek waar $|t_2/t_1| \rightarrow \infty$. Deze fase wordt de *topologische fase* genoemd.



Figuur 2.5: Schematische voorstelling van de drie limietgevallen van t_2/t_1 . In het eerste geval wordt de normale keten voorgesteld waarbij $t_2 < t_1$. Geval b) toont wat er gebeurt wanneer t_2 naar nul gaat, wat $N/2$ niet interagerende moleculen veroorzaakt. Het laatste geval toont dat wanneer t_1 naar nul gaat, er twee verschillende atomen aan de rand overblijven, wat zorgt voor een ontaard energieniveau.

Om de bewering dat het ontaarde energieniveau in de topologische fase afkomstig is van de vrije atomen aan de rand van de keten hard te maken, wordt de waarschijnlijkheidsverdeling van de elektronen bij dit energieniveau berekend. Dit kan door de modulus kwadraat van de coëfficiënten van de eigenvectoren bij $E = 0$ te nemen en deze in functie van de positie van de verschillende eenheidscellen te plotten. Het resultaat is te zien in onderstaande grafiek.



Figuur 2.6: Een grafiek die de waarschijnlijkheidsamplitude, $|\psi_A|^2$ en $|\psi_B|^2$, weergeeft in functie van de eenheidscel met $t_2/t_1 = -2$. Voor $N = 60$ atomen zijn er 30 eenheidscellen.

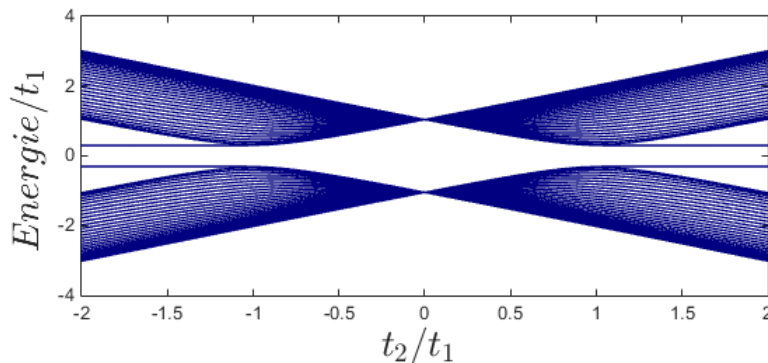
Het is duidelijk dat de $E = 0$ toestanden gelokaliseerd zijn rond atomen aan de rand. Specifiek is zichtbaar dat dit aan het linkeruiteinde van de keten een A-atoom is en aan het rechteruiteinde van de keten een B-atoom is, zoals te zien is op figuur 2.4.

Zoals eerder vermeld gaat de faseovergang tussen de triviale en topologische fase gepaard met het sluiten van de bandgap. Op dit punt naderen de energieniveaus elkaar tot op zulke afstand, dat ze elkaar kunnen afstoten. De strikte eis dat de bandgap moet sluiten om een faseovergang te verkrijgen, maakt dat de topologische randtoestanden a.h.w. beschermd zijn tegen het vervallen naar de triviale fase. Dit is de essentie van topologische isolatoren, waarbij de geleidende randtoestanden worden afgeschermd van de niet-geleidende bulktoestanden door de gap

De unieke eigenschap van topologische isolatoren is dat deze grens tussen rand- en bulktoestanden een robuuste scheiding is. Om dit te verklaren moet er gekeken worden naar de oorzaak van de faseovergang die voor de scheiding tussen beide gebieden zorgt. Deze oorzaak is het fundamentele principe van symmetrie.

Eerder in deze sectie werd vermeld dat er een symmetrie in de polyacetyleen keten is opgelegd, namelijk dat de grondtoestand van de valentieelektronen (de on-site potentiaal) van *beide* atomen (A en B) gelijk wordt gekozen en arbitrair op nul wordt verondersteld. Ter herinnering: er wordt hier gesproken over atomen A en B , wat niet wil zeggen dat dit verschillende atomen zijn, de verschillende benaming komt enkel van het feit dat hun omgeving niet identiek is. Nu zal onderzocht worden wat er gebeurt wanneer deze symmetrie gebroken wordt.

Stel dat de on-site potentiaal van beide atomen niet gelijk wordt verondersteld maar tegengesteld aan elkaar wordt gekozen, zeg $-\mu$ en $+\mu$. Om dit in het model te verwerken wordt gebruik gemaakt van de kracht van de creatie- en annihilatieoperatoren. De matrixvorm van de hamiltoniaan (2.47) kan eenvoudig worden aangepast door in T_{mn} de diagonaal elementen niet nul te stellen. Deze stellen namelijk de on-site energie voor van afwisselend de A en B atomen. De breking van deze inversiesymmetrie wordt dus in rekening gebracht door op de diagonaal afwisselend μ en $-\mu$ in te vullen, waarmee volgend resultaat verkregen wordt:

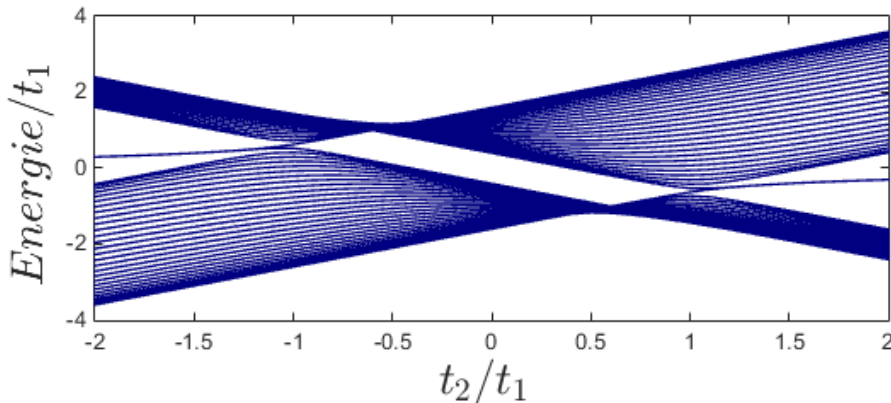


Figuur 2.7: De energiedistributie van een eindige polyacetyleen waarbij de on-site potentiaal van A en B resp. gekozen werd op $\mu = 0.3$ en $-\mu = -0.3$. Dit breekt de voorheen opgelegde symmetrie, wat zorgt voor het openen van de bandgap.

Het valt meteen op dat er geen ontaard energieniveau meer is en dat de bandgap op geen enkel punt sluit. Voor elke waarde van t_2/t_1 zal de keten zich in de triviale fase bevinden. Door het breken van de symmetrie die voorop was gesteld is er dus geen sprake meer van een topologische fase. Dit resultaat strookt met wat eerder werd gesteld dat de grens tussen topologische en triviale toestanden inderdaad beschermd wordt door de symmetrie van het systeem, wat een robuuste afscherming biedt.

Er dient opgemerkt te worden dat in het geval van de ééndimensionale keten de beschermende symmetrie het gelijk stellen is van de on-site potentiaal, wat echter niet het geval is bij de meeste onderzochte materialen. In het onderzoek naar topologische isolatie in halfgeleiders wordt tijdsomkeer symmetrie gebruikt als beschermende symmetrie. Deze symmetrie is veel algemener en robuuster dan de symmetrie die hier beschouwd werd.

Om het onderzoek op de eindige polyacetyleen keten te eindigen is het niet overbodig om zich af te vragen of het hele verhaal niet enkel opgaat omdat er benaderingen werden toegepast. Namelijk het feit dat er enkel naaste naburen-interactie werd beschouwd. Dit kan, opnieuw door de eenvoudige maar krachtige matrixnotatie van de hamiltoniaan (2.47), eenvoudig onderzocht worden door ook interactie te beschouwen tussen atomen die verder uit elkaar liggen. Bijvoorbeeld wordt de interactie tussen de naburige A -atomen en B -atomen en rekening gebracht door op de 2^{de} orde nevendagonalen van T_{nm} de bindingssterkte t_3 te introduceren. Deze karakteriseert de overgangsamplitude van elektronen die tussen gelijkwaardige atomen hopen. Uiteraard is deze voor elk paar atomen gelijk omdat het elektron zowel een enkele als dubbele binding moet overbruggen. Wanneer dit wordt in rekening gebracht wordt volgend resultaat bekomen:



Figuur 2.8: De energiedistributie van een eindige polyacetyleen waarbij een hogere orde van interactie werd meegenomen. De binding tussen gelijkwaardige atomen wordt, zoals in figuur 2.2 gedefiniëerd werd als t_3 , wordt in dit geval de waarde 0.3 toegewezen.

Buiten het feit dat de banden niet meer symmetrisch zijn rond $t_2/t_1 = 0$, is het duidelijk dat er echter wel een ontaard energie niveau ontstaat. Het onderscheid tussen de topologische en triviale fase blijft, wat wil zeggen dat de gevoerde uiteenzetting van deze sectie blijft gelden wanneer hogere orden interactie worden meegenomen.

2.2.3 De oneindige keten

Wanneer in vorige sectie het aantal atomen naar oneindig zou gaan, wordt de eindige polyacetyleen keten een oneindige keten. Deze stap lijkt misschien een eenvoudige uitbreiding, toch zal er een andere aanpak nodig zijn mits het niet meer doenbaar is om met matrices van oneindige omvang te rekenen.

Om te beginnen kan formeel de hamiltoniaan als oneindige som voorgesteld worden als (analoog aan (2.46))

$$\hat{H} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} t_1 c_{B_n}^\dagger c_{A_n} + t_2 c_{A_{n+1}}^\dagger c_{B_n} + h.c. , \quad (2.48)$$

waarbij de som nu tot oneindig loopt in plaats van te stoppen bij N .

Het oneindig zijn van de keten kan gemodelleerd worden door gepaste randvoorwaarden op te leggen. Een oneindige keten heeft als eigenschap dat hoe veel eenheidscellen er ook wordt opgeschoven, de omgeving exact dezelfde zal zijn. Dit is ook het geval wanneer de eindige keten gesloten wordt zodat het een kring vormt. Dit kan vertaald worden door *periodische randvoorwaarden* op te leggen, mathematisch vertaald als

$$c_{A_n}^\dagger = c_{A_{n+N}}^\dagger , \quad (2.49)$$

wat ook kan geschreven worden voor de annihilatieoperator en volledig gelijk is aan het geval voor de B -atomen.

Dit verband kan geschreven worden in de e -macht notatie van operatoren wat inhoudt dat

$$e^{-ikN} = 1 \quad \Rightarrow \quad k = \frac{2\pi}{N} p , p = 0, \dots, N-1 . \quad (2.50)$$

Nu de periodische aard van de keten is ingevoerd, kan de hamiltoniaan (2.48) anders geschreven worden door over te gaan naar zogenaamde *natuurlijke coördinaten*, die gegeven zijn door

$$c_{A_k}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{ikn} c_{A_n}^\dagger \quad (2.51)$$

$$c_{B_k}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{ikn} c_{B_n}^\dagger \quad (2.52)$$

en de inverse transformatie door

$$c_{A_n}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikn} c_{A_k}^\dagger \quad (2.53)$$

$$c_{B_n}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikn} c_{B_k}^\dagger , \quad (2.54)$$

waarbij de voorfactor $1/\sqrt{N}$ zorgt voor normering.

Merk op dat voor de annihilatieoperatoren de complex toegevoegde van de transformaties geldt.

Deze transformaties zijn de gekende Fouriertransformaties. Ze worden ingevoerd mede doordat de randvoorwaarde een periodische eis oplegt aan de creatie- en annihilatieoperatoren.

Wanneer deze transformaties precies worden uitgevoerd, zie appendix I voor de volledige berekening, kan de hamiltoniaan van de oneindige keten, in functie van de normaalcoördinaten, geschreven worden als

$$H(k) = \sum_k (t_1 + t_2 e^{ik}) c_{B_k}^\dagger c_{A_k} + (t_1 + t_2 e^{-ik}) c_{A_k}^\dagger c_{B_k} . \quad (2.55)$$

Deze uitdrukking kan weer omgezet worden in een matrixvorm die verdere berekeningen enorm vergemakkelijkt. Hiervoor wordt de volgende grootheid gedefiniëerd: h_{IJ} , waarbij $I, J \in \{A, B\}$. Zo stelt de grootheid h_{AA} bijvoorbeeld de on-site potentiaal van A voor en h_{AB} de interactie energie tussen A_n en B_n voor. Met deze grootheden kan een matrix geconstrueerd worden:

$$T_{IJ} = \begin{matrix} & A & B \\ \begin{matrix} A \\ B \end{matrix} & \begin{pmatrix} 0 & t_1 + t_2 e^{-ik} \\ t_1 + t_2 e^{+ik} & 0 \end{pmatrix} \end{matrix} , \quad (2.56)$$

waarvan de elementen gegeven worden door $T_{IJ} = h_{IJ}$. Deze matrix is het analogon van de matrix T_{mn} uit uitdrukking (2.47) van de eindige keten. Bijgevolg wordt volledig analoog gewerkt en kan de hamiltoniaan (2.55) geschreven worden als

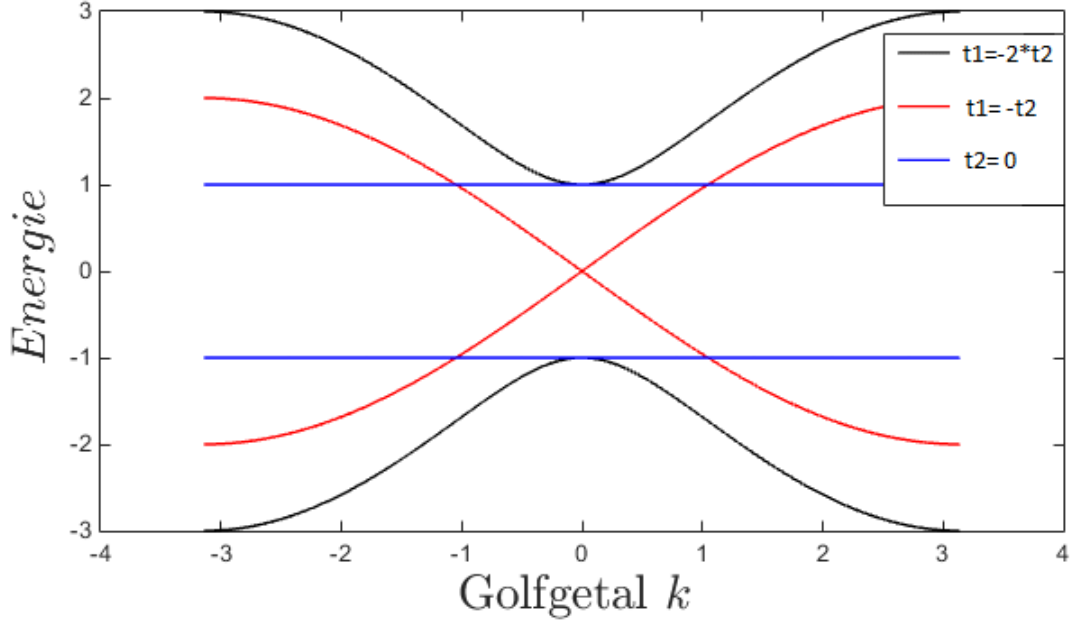
$$\hat{H} = \sum_k \begin{pmatrix} c_{A_k}^\dagger & c_{B_k}^\dagger \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & t_1 + t_2 e^{-ik} \\ t_1 + t_2 e^{+ik} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_{A_k} \\ c_{B_k} \end{pmatrix} . \quad (2.57)$$

Om wederom inzicht te krijgen in hoe de relatieve bindingsverhouding t_2/t_1 de bandenstructuur (i.e. de energie in functie van het golfgetal k) beïnvloedt, worden de limietgevallen van t_2 bestudeerd om te zien of er overeenkomst is met de eindige keten.

Figuur 2.8 stelt de bandenstructuur van de oneindige keten voor in de eerste Brillouin zone, van $k = -\pi$ tot $k = \pi$. De drie limietgevallen zijn hierop te zien en geven informatie die overeenstemt met de conclusies van vorige sectie.

De drielimietgevallen van t_2 zijn

- $|t_2| > |t_1|$, waarbij te zien is dat de bandgap niet sluit in $k = 0$.
- $|t_2| = t_1$, waarbij de band sluit, exact op $k = 0$.
- $t_2 = 0$, wat wil zeggen dat de keten is opgebroken in oneindig veel, niet interagerende diatomaire moleculen waarvan het energieniveau is opgesplitst in twee subniveaus.



Figuur 2.9: De bandenstructuur van een oneindige polyacetyleen keten in drie limietgevallen. De zwarte curve stelt het normal geval voor, waarbij $t_2 < t_1$. De rode curve stelt een keten voor waarbij $t_2 = t_1$, waarbij een sluiting van de bandgap optreedt. De blauwe curve stelt het limiet geval $t_2 = 0$ voor, waarbij de keten ontbonden is in niet interagerende moleculen.

Om verdere analyse van de keten te beschouwen kunnen, gegeven de matrix T_{IJ} van (2.56), de energie eigenwaarden ook analytisch berekend worden:

$$E_k^2 = |t_1 + t_2 e^{ik}|^2 = (t_1 + t_2 \cos(k))^2 + (t_2 \sin(k))^2, \quad (2.58)$$

waaruit, gegeven dat $t_1 = 1$, bovenstaande limiet gevallen bevestigd worden.

Verder kan (2.57) geschreven worden als de zogenaamde Dirac hamiltoniaan, die de vorm

$$H(k) = f(k)\sigma_x + g(k)\sigma_y \quad (2.59)$$

heeft. $f(k)$ en $g(k)$ zijn willekeurige, te bepalen functies, en σ_x, σ_y zijn Pauli Matrices. Gebruik makend van de Euler relatie $e^{i\theta} = \cos(\theta) + i \sin(\theta)$, kunnen $f(k)$ en $g(k)$ geïdentificeerd worden en wordt de Dirac hamiltoniaan voor de oneindige keten

$$H(k) = [t_1 + t_2 \cos(k)]\sigma_x + [t_2 \sin(k)]\sigma_y. \quad (2.60)$$

In deze vorm kan er onderzocht worden of het modelsysteem tijdsomkeer invariant is. Omdat spin niet in rekening wordt gebracht, wordt als tijdsomkeer operator T de uitdrukking gebruikt voor het spinloze geval. In dit geval komt de tijdsomkeer operator overeen met de complex toevoegingsoperator K . Wegens het aanwezig zijn van de term in σ_y in de hamiltoniaan, en het feit dat $K(\sigma_y) = -\sigma_y$, voldoet de hamiltoniaan aan de eis dat $K\hat{H}(k)K = \hat{H}(-k)$. Het systeem is dus tijdsomkeer invariant.

Om het gedrag rond de bandgap aan de rand van de Brillouin zone te bestuderen wordt er op deze hamiltoniaan een Taylor expansie uitgevoerd rond $k = 0$, met $t_2 = -t_1$ en volledig analoog rond $k = \pi$ met $t_2 = t_1$. Als enkel de lineaire termen beschouwd worden levert dit voor het eerste geval

$$H(k) = [t_1 + t_2]\sigma_x + [t_2k]\sigma_y \equiv m\sigma_x + vk\sigma_y, \quad (2.61)$$

De hamiltoniaan is lineair in de kristalimpuls k , een eigenschap van Dirac Hamiltonianen. m wordt de massa genoemd en is in dit geval gelijk aan $(t_1 + t_2)$. Deze grootte is karakteriserend voor de grootte van de bandgap, die wordt gegeven door $|2m|$. Gebruik makend van deze notatie kunnen de verschillende fasen onderscheiden worden:

- $m < 0$ komt overeen met de topologische fase
- $m > 0$ komt overeen met de triviale fase
- $m = 0$ komt overeen met de faseovergang

Het is deze faseovergang die nu onderzocht zal worden.

2.2.4 De overgangsfase

Het doel is om een plaatsafhankelijkheid voor de massa m te bepalen. Om dit te bekomen wordt de Dirac hamiltoniaan (2.61) geschreven in zijn positierepresentatie waar $k \rightarrow -i\frac{\partial}{\partial x}$ geldt. Voor de eenvoud wordt het ontaarde energieniveau op $E = 0$ gekozen en wordt de op te lossen differentiaal vergelijking $H(x) = 0$ of

$$(m(x)\sigma_x - iv\sigma_y\partial_x)\Psi(x) = 0. \quad (2.62)$$

Dit levert twee differentiaal vergelijkingen, elk voor één van de twee componenten $\psi_A(x)$ en $\psi_B(x)$ van $\Psi(x)$.

Links vermenigvuldigen met σ_y en componentsgewijs uitschrijven levert het volgende stelsel differentiaal vergelijkingen op:

$$\begin{aligned} -\frac{m(x)}{v}\psi_A(x) &= \psi'_A(x) \\ \frac{m(x)}{v}\psi_B(x) &= \psi'_B(x). \end{aligned}$$

De vergelijkingen zijn zo, dat, moest $m(x)$ constant zijn, de oplossingen e-machten zijn. Nu zal de ene oplossing naar oneindig gaan wanneer de andere naar nul gaat en omgekeerd. Een component van de golf functie die oneindig wordt is niet fysisch. Hierdoor zal één van de componenten van $\Psi(x)$ nul gekozen moeten worden. Hier zal $\psi_B = 0$ gekozen worden. De oplossingen van de differentiaal vergelijking in $\psi_A(x)$ is triviaal wanneer $m(x)$ een constante is, nl.

$$\psi_A(x) = Ce^{-\frac{m}{v}x}. \quad (2.63)$$

Omdat $m(x)$ expliciet van x afhangt, wordt hiervoor gecorrigeert. De oplossing wordt

$$\boxed{\psi_A(x) = Ce^{\int^x \frac{m(x')}{v} dx'}}, \quad (2.64)$$

waarbij C een normalisatie constante is die kan worden weggewerkt door de ondergrens van de intergraal. Door te eisen dat $\psi_A(\infty) = 0$, voldoen lang niet alle functievormen voor

$m(x)$. De eenvoudigste vorm is deze die voor $x \rightarrow +\infty$ een constante is en voor $x \rightarrow -\infty$ tegengesteld is. Dit komt neer op de heaviside stapfunctie en heeft als voorschrift

$$m(x) = m_0 \text{sign}(x) . \quad (2.65)$$

Dit resultaat kan geïnterpreteerd worden als een halfoneindige keten met $t_2 > t_1$ en die op $m(x) = 0$ abrupt stopt.

Om te zien of het gevonden resultaat consistent is met het geheel, wordt de halfoneindige keten onderzocht. Door analoog te werk te gaan als bij de eindige en oneindige keten wordt de energie bepaald door de vergelijking $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ op te lossen d.m.v. creatie- en annihilatieoperatoren in te voeren. Vanuit

$$\begin{aligned} H &= \sum_{i=1}^{\infty} (t_1 c_{B_i}^\dagger c_{A_i} + t_2 c_{A_{i+1}}^\dagger c_{B_i} + h.c.) \\ |\Psi\rangle &= \sum_n (\psi_{A_n} c_{A_n}^\dagger + \psi_{B_n} c_{B_n}^\dagger) |0\rangle \end{aligned}$$

wordt $H|\Psi\rangle$ berekend, zie Appendix II, zodat na identificatie met $E|\Psi\rangle$ en het feit dat om fysische oplossingen te hebben voor $\Psi(x)$ de B-component nul gekozen werd, volgt dat

$$\psi_{A_{i+1}} = -\frac{t_1}{t_2} \psi_{A_i} = \left(-\frac{t_1}{t_2}\right)^i \psi_{A_1} . \quad (2.66)$$

Wat enkel een fysische oplossing heeft als $|\frac{t_1}{t_2}| < 1$. Dit is consistent met wat uit vorige sectie werd bekomen.

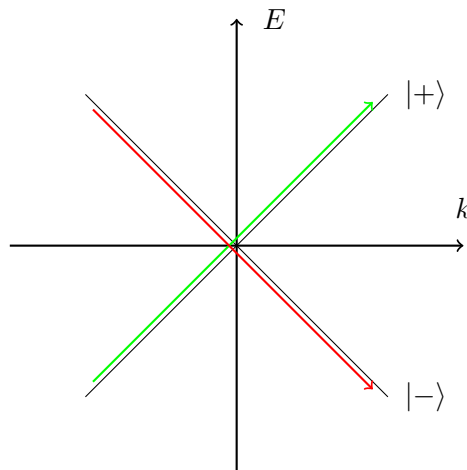
Er werd in deze sectie dus aangetoond dat er bij een polyacetyleenketen topologische randtoestanden voorkomen. Deze toestanden verschillen echter t.o.v. de topologische toestanden in de courant onderzochte materialen waar dit fenomeen zich voordoet. Dit verschil vind zijn oorsprong in het feit dat de topologische toestanden bij polyacetyleen niet beschermd zijn door de tijdsomkeer symmetrie, maar zoals aangetoond, een andere symmetrie.

2.3 2D toepassing: strip

In het voorgaande is er een modelhamiltoniaan opgesteld voor een oneindige, ééndimensionale keten van atomen. Deze laat een duidelijk onderscheid toe tussen triviale en topologische fases door een bepaalde parameter van de Dirac hamiltoniaan rond speciale punten in de parameter ruimte. Het is op dit moment interessant om een stap verder te gaan en de dimensie van het modelsysteem met één te verhogen om een twee dimensionale strip te modelleren. Er wordt onderzocht, zoals bij het ééndimensionaal model, of er een modelhamiltoniaan opgesteld kan worden die het mogelijk maakt om een onderscheid te maken tussen triviale en topologische fases, indien deze aanwezig zijn.

De uitbreiding naar de tweede dimensie komt tot stand door meerdere oneindige ketens parallel te plaatsen en deze te laten interageren met elkaar. Specifiek wordt er voor dit model gekeken naar het geval waarbij de individuele ketens zich in de toestand bevinden waarbij $t_1 = -t_2$.

In dit geval zal elke keten, rond de raakpunten in de bandenstructuur, twee toestanden hebben, nl. rechtsbewegende toestanden $|+\rangle$ en linksbewegende toestanden $|-\rangle$. Dit kan schematisch weergegeven worden door in figuur 2.9, voor het geval $t_1 = -t_2$, het gebied rond $k = 0$ uit te vergroten:

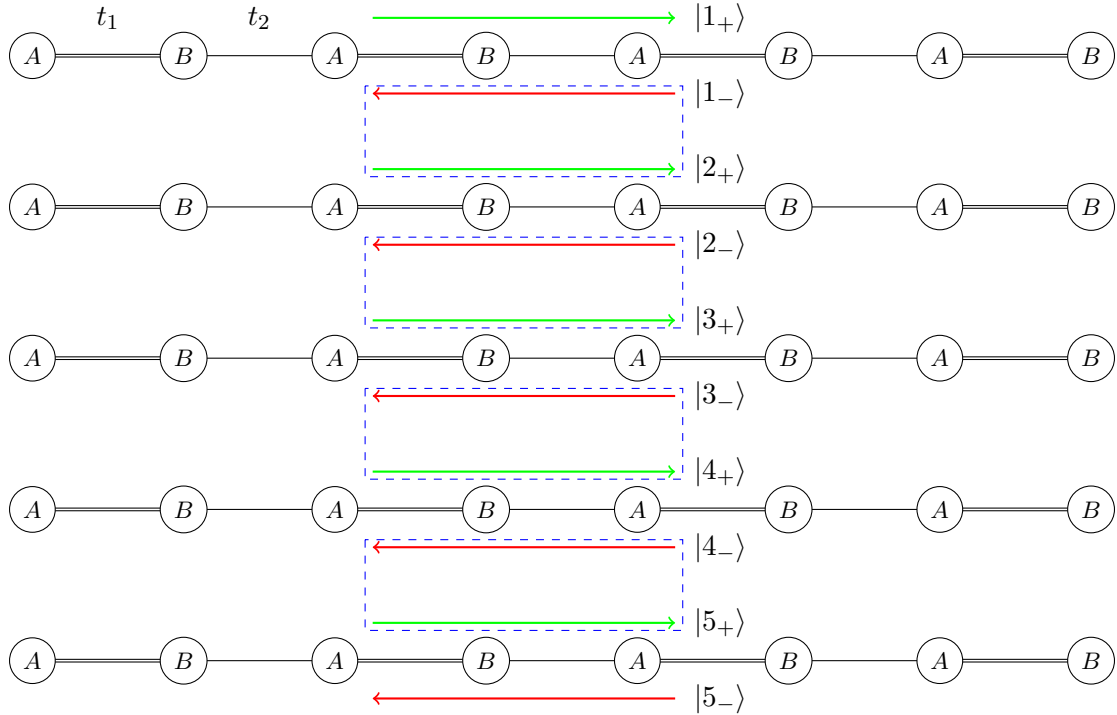


Figuur 2.10: Schematische voorstelling van de rechtsbewegende en linksbewegende toestanden van de ééndimensionale oneindige keten waarbij $t_1 = -t_2$ wordt gekozen. De figuur is een vergroting van de grafiek weergegeven op figuur 2.9.

Ook in dit model wordt er onderscheid gemaakt tussen de eindige en oneindige strip. Hiermee wordt bedoeld dat in het eerste geval het aantal oneindige ketens die parallel geplaatst worden, eindig is. In het tweede geval zal dit aantal als oneindig beschouwd worden.

Wanneer enkel naaste nabuur interacties in rekening worden gebracht, zullen de rechtsbewegers $|+\rangle$ en de linksbewegers $|-\rangle$ van naburige ketens met elkaar interageren en zodoende de netto verplaatsing teniet doen. Ze zullen a.h.w. elkaar opheffen zodat de bulk elektronen geen netto verplaatsing kunnen ondergaan.

Het model wordt schematisch weergegeven door onderstaande figuur.



Figuur 2.11: Een schematische weergave van het gebruikte model voor een twee dimensionale strip van atomen. Hierbij worden individuele, oneindige ketens parallel geplaatst. Elke individuele keten heeft een rechtsbewegende en linksbewegende toestand, resp. aangeduid door $|n_+\rangle$ en $|n_-\rangle$, waarbij n het rangnummer is van de keten. Enkel naaste naburen interactie wordt beschouwd.

Er wordt analoog tewerk gegaan als in het één dimensionale geval. Er wordt een koppeling ingevoerd die de interactie tussen de verschillende ketens beschrijft onder de opgelegde aannames. Met behulp van creatie- en annihilatieoperatoren zal er een modelhamiltoniaan worden opgesteld. De oneindige (bulk)-hamiltoniaan kan onderzocht worden op punten waardat de bandgap sluit om zo eventuele topologische fases te onderzoeken.

2.3.1 Modelhamiltoniaan

De rechtsbewegende en linkbewegende toestanden, resp. $|+\rangle$ en $|-\rangle$, zijn eigentoestanden van de Dirac hamiltoniaan (2.61). Hierbij wordt enkel gekeken naar het speciale geval waarbij $m = 0$ of equivalent $t_1 = -t_2$. Hieruit volgt dat de eigentoestanden van deze

hamiltoniaan, eigentoestanden zijn van σ_y , nl.

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \quad (2.67)$$

$$|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}. \quad (2.68)$$

De eis die opgelegd wordt aan de interacties tussen de verschillende ketens is, zoals eerder vermeld, het feit dat enkel naaste naburen interacties worden beschouwd. Een rechtsbeweger van keten n mag bijvoorbeeld niet interageren met een rechtsbeweger van keten $n+1$.

Deze eis wordt wiskundig vertaald door een i.p.v. een scalair als koppelingsfactor, een matrix A als interactieoperator in te voeren. De matrix wordt zo opgesteld dat hij bijvoorbeeld een linksbeweger $|n_-\rangle$ laat koppelen met de rechtsbeweger $|(n+1)_+\rangle$. Het kan eenvoudig ingezien worden dat, gebruikmakend van (2.67) en (2.68), deze operator geconstrueerd kan worden door

$$\gamma|+\rangle\langle-| = \frac{\gamma}{2} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & -1 \end{pmatrix} \quad (2.69)$$

te beschouwen, waarbij γ als bindingsterkte wordt ingevoerd. Door gebruik te maken van de orthonormaliteit van de hamiltoniaan eigentoestanden $|+\rangle$ en $|-\rangle$, kan ingezien worden dat de operator werkt zoals geëist:

$$(|+\rangle\langle-||+\rangle = 0 \quad (2.70)$$

$$(|+\rangle\langle-||-\rangle = |+\rangle. \quad (2.71)$$

Er dient opgemerkt te worden dat wanneer de omgekeerde interactie wordt beschouwd, dat dan de complex toegevoegde operator beschouwd moet worden. Deze is $|-\rangle\langle+|$ en heeft een analoge werking op rechts- en linksbewegende toestanden.

Alvorens de modelhamiltoniaan wordt opgesteld wordt meegegeven dat de interactiematrix A ook geschreven kan worden als $\frac{\gamma}{2}(\sigma_z + i\sigma_x)$, de inverse operator wordt op dezelfde manier geschreven als $\frac{\gamma}{2}(\sigma_z - i\sigma_x)$. Dit zal later handig van pas komen bij het opstellen van de bulkhamiltoniaan.

2.3.2 Eindige keten

Omdat volgens het model de strip is opgebouwd uit parallel gelegen ééndimensionale ketens, moet de Hamiltoniaan van uitdrukking (2.46) uiteraard terug te vinden zijn in de totale hamiltoniaan. Verder moet er ook een deel aanwezig zijn die de interactie van de verschillende ketens onderling beschrijft. Wanneer voor de totale hamiltoniaan $\hat{H}(k_x, k_y)$ wordt genoteerd, valt deze dus te schrijven als de som van $\hat{H}_{1D}(k_x)$ en $\hat{H}_S(k_y)$, waarbij de eerste de onderlinge ketens beschrijft (zie uitdrukking (2.46)) en de tweede de interactie tussen naburige ketens.

Om een uitdrukking te vinden voor $\hat{H}_S(k_y)$, wordt er op analoge wijze gewerkt als bij het ééndimensionale geval, namelijk met creatie- en annihilatieoperatoren. Voor het annihileren van een toestand op atoom A van de n -de keten voor het creëren van een toestand

op atoom A van de $(n+1)$ -ste keten, wordt de notatie $c_{(n+1)A}^\dagger c_{nA}$ gebruikt. Op deze manier kan, analoog aan (2.47), \hat{H}_S geschreven worden als

$$\hat{H}_S = \begin{pmatrix} c_{(n+1)A}^\dagger & c_{(n+1)B}^\dagger \end{pmatrix} \cdot \frac{\gamma}{2} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_{nA} \\ c_{nB} \end{pmatrix} + h.c. , \quad (2.72)$$

waarbij enkel werd gekeken naar interactie tussen de $(n+1)$ -ste en n -de keten, met h.c. het complex toegevoegde van het voorgaande.

Gebruikmakend van de kennis van de hamiltoniaan van een ééndimensionale keten, kan dit in een eindige som over alle ketens en atomen uitgeschreven worden:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_{1D} + \hat{H}_S \\ &= \sum_{m,n=1}^N \left[\left[t_1 c_{m,nB}^\dagger c_{m,nA} + t_2 c_{m+1,nA}^\dagger c_{m,nB} + h.c. + h.c. \right] + \dots \right. \\ &\quad \left. \dots + \left[\frac{\gamma}{2} \left(c_{(m,n+1)A}^\dagger c_{m,nA} + i c_{(m,n+1)B}^\dagger c_{m,nA} + i c_{(m,n+1)A}^\dagger c_{m,nB} - c_{(m,n+1)B}^\dagger c_{m,nB} \right) + h.c. \right] \right] \end{aligned} \quad (2.73)$$

Hierbij is de index m de atoomindex en n de ketenindex.

De eindige strip wordt beschreven door een eindig aantal, zeg N , ééndimensionale, oneindige ketens die zich parallel naast elkaar bevinden. De totale hamiltoniaan kan eenvoudig in matrixvorm geschreven worden, analoog aan (2.47):

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} c_{1A}^\dagger & c_{1B}^\dagger & \dots & c_{NA}^\dagger & c_{NB}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{H}_{1D} & A & \dots & 0 \\ A^* & \hat{H}_{1D} & A & \vdots \\ & A^* & \hat{H}_{1D} & A & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & A \\ 0 & 0 & \dots & A^* & \hat{H}_{1D} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{1A} \\ c_{1B} \\ \vdots \\ c_{NA} \\ c_{NB} \end{pmatrix} \quad (2.74)$$

waarbij \hat{H}_{1D} , A en A^* de hiervoor gedefiniëerde matrices zijn. Dit zorgt ervoor dat de totale hamiltoniaan in matrix vorm dus blok tridiagonaal is. Deze voorstelling van de hamiltoniaan van de eindige strip zal later gebruikt worden wanneer er onderzocht wordt of er al dan niet beschermde randtoestanden optreden.

2.3.3 Oneindige strip

Wanneer het aantal parallele ketens oneindig wordt beschouwd, kan de (bulk)hamiltoniaan wederom berekend worden door periodische randvoorwaarden (2.49) in rekening te brengen. Dezelfde fourier transformaties (2.53), (2.54) worden gebruikt om de totale hamiltoniaan in functie van de continue parameters k_x en k_y te zetten. Echter, het eerste deel van de totale hamiltoniaan, \hat{H}_{1D} werd reeds in vorige sectie berekend en kan dus volledig overgenomen worden:

$$\hat{H}_{1D}(k_x) = \sum_{k_x} (t_1 + t_2 e^{ik_x}) c_{k_x B}^\dagger c_{k_x A} + (t_2 e^{-ik_x} + t_1) c_{k_x A}^\dagger c_{k_x B} . \quad (2.75)$$

Hierbij wordt expliciet vermeld dat deze enkel van de variabele k_x afhankelijk is. Het tweede deel van de totale hamiltoniaan, \hat{H}_S , wordt op dezelfde manier fourier getrans-

formeerd naar de continue variabele k_y en levert

$$\begin{aligned} \hat{H}_S(k_y) = & \sum_{k_y} \frac{\gamma}{2} \left[c_{k_y A}^\dagger c_{k_y A} (e^{ik_y} + e^{-ik_y}) - c_{k_y B}^\dagger c_{k_y A} i (e^{ik_y} - e^{-ik_y}) - \dots \right. \\ & \left. \dots c_{k_y A}^\dagger c_{k_y B} i (e^{ik_y} - e^{-ik_y}) - c_{k_y B}^\dagger c_{k_y B} (e^{ik_y} + e^{-ik_y}) \right]. \end{aligned} \quad (2.76)$$

Wanneer beide delen van de totale hamiltoniaan worden opgeteld en deze, analoog aan (2.57), geschreven worden in matrix vorm, wordt de uitdrukking voor de totale hamiltoniaan

$$H(k_x, k_y) = \begin{pmatrix} \gamma \cos(k_y) & t_1 + t_2 e^{-ik} + \gamma \sin(k_y) \\ t_1 + t_2 e^{+ik} + \gamma \sin(k_y) & -\gamma \cos(k_y) \end{pmatrix}. \quad (2.77)$$

Deze matrix vorm kan geschreven worden als functie van de Paulimatrixes $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ wordt de uiteindelijke vorm van de bulk hamiltoniaan verkregen:

$$\boxed{\hat{H}_{tot}(\vec{k}) = [t_1 + t_2 \cos(k_x) + \gamma \sin(k_y)]\sigma_x + [t_2 \sin(k_x)]\sigma_y + [\gamma \cos(k_y)]\sigma_z}, \quad (2.78)$$

met $\vec{k} = (k_x, k_y)$.

Analoog aan het ééndimensionale geval, wordt er gekeken naar het al dan niet aanwezig zijn van topologische fasen van het systeem. Deze fase gaat, zoals bij de ééndimensionale keten, gepaard met een aanwezige symmetrie van de hamiltoniaan die het systeem beschrijft. Het is dus nuttig om na te gaan of de verkregen hamiltoniaan (2.78) symmetrieën bevat.

Inversiesymmetrie

De eerste eigenschap is inversiesymmetrie. Inversie kan voorgesteld worden door een spiegelvlak als middelloodvlak tussen twee atomen A en B te plaatsen. Het systeem is dan inversiesymmetrisch als het zo bekomen inverse systeem door dezelfde hamiltoniaan wordt beschreven als het oorspronkelijke.

Wanneer naar de schematische afbeelding van het stip-model wordt gekeken, is het duidelijk dan een dergelijke operatie niets anders is dan de A en B atomen met elkaar verwisselen. Dit komt neer door bv. volgende operatie:

$$\begin{pmatrix} c_{n_A} \\ c_{n_B} \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} c_{n_B} \\ c_{n_A} \end{pmatrix}. \quad (2.79)$$

Dit wordt verwezenlijkt door de matrix σ_x , die dus geschikt is als inversie-operator. Rekening houdend met het feit dat voor Paulimatrixes geldt dat $\sigma_i = (\sigma_i)^{-1}$, wordt de inversie operatie op het twee dimensionale systeem geschreven als $\sigma_x \hat{H}_{tot}(\vec{k}) \sigma_x$. De eis dat de hamiltoniaan inversie symmetrische is, komt dus neer op

$$\sigma_x H(\vec{k}) \sigma_x = H(-\vec{k}). \quad (2.80)$$

Voor een algemene hamiltoniaan

$$H(\vec{k}) = f(\vec{k})\sigma_x + g(\vec{k})\sigma_y + h(\vec{k})\sigma_z, \quad (2.81)$$

kunnen er, door gebruik te maken van de anti-commutatierelaties tussen Paulimatrixes, die gegeven zijn door $i, j = \{x, y, z\}$ dat $\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}I$, met I de eenheidsmatrix, eenvoudige

restricties opgelegd worden aan de coëfficiënten, namelijk dat $f(\vec{k})$ een even functie moet zijn en $g(\vec{k}), h(\vec{k})$ oneven functies moeten zijn.

Het is meteen duidelijk dat uitdrukking (2.78) geen inversiesymmetrie bezit, en dit omwille van het feit dat de functie die bij σ_z hoort, een cosinus is, waarvan geweten is dat deze een even functie is. Deze asymmetrie kan echter eenvoudig opgelost worden door terug te kijken naar de oorsprong van deze term bij σ_z .

Wanneer enkel naar het 1D-gedeelte van de hamiltoniaan wordt gekeken, \widehat{H}_{1D} , is het eenvoudig te zien dat deze wél voldoet aan de inversie symmetrie eisen. Hieruit wordt geconcludeerd dat de oneindige, één dimensionale keten invers symmetrisch is.

De bijdragen $\gamma \cos(k_y)\sigma_z$ en $\gamma \sin(k_y)\sigma_x$ komen van het interactiedeel van de totale hamiltoniaan, \widehat{H}_S . Het feit dat hier een cosinus en sinus staat, resp. bij σ_z en σ_x , is volledig te herleiden tot het feit dat de interactiematrix A geschreven werd als $\frac{\gamma}{2}(\sigma_z + i\sigma_x)$. Hierbij leidt de expliciete factor i tot de sinus bij σ_x . Deze imaginaire éénheid kan a.h.w. verschoven worden naar σ_z indien de koppelingssterkte γ vervangen wordt door $i\gamma$.

Wanneer de berekeningen hernomen worden met interactiematrix $A = \frac{i\gamma}{2}(\sigma_z + i\sigma_x)$, wordt de volgend hamiltoniaan bekomen

$$\widehat{H}(\vec{k}) = [t_1 + t_2 \cos(k_x) + \gamma \cos(k_y)]\sigma_x + [t_2 \sin(k_x)]\sigma_y + [\gamma \sin(k_y)]\sigma_z . \quad (2.82)$$

Deze voldoet aan de eisen voor inversiesymmetrie en het is deze hamiltoniaan waarmee verder gewerkt zal worden.

Tijdsomkeersymmetrie

Zoals in het geval van de één dimensionale keten, wordt nog steeds gewerkt met spinloze systemen. Hierdoor wordt de tijdsomkeer operator T gegeven door de complex toevoegings operator K . Een systeem dat tijdsomkeersymmetrisch is, moet voldoen aan volgende relatie

$$KH(\vec{k})K = H(-\vec{k}) . \quad (2.83)$$

Doordat de modelhamiltoniaan (2.82) een term in σ_z heeft, zal deze niet voldoen aan (2.83) en is het systeem dus niet tijdsomkeerinvariant.

2.3.4 Gapsluitingspunten van de hamiltoniaan

Bij de één dimensionale keten waren het de gapsluitingspunten die de grens vormden tussen de triviale en topologische fase van het systeem. Het is daarom interessant om ook bij dit modelsysteem naar de gapsluitingspunten van het systeem te bekijken.

Het zoeken naar punten in de parameter ruimte (k_x, k_y) waardat de bandgap sluit is vrij eenvoudig omwille van het feit dat de hamiltoniaan een vorm heeft waarbij ze geschreven kan worden als functie van Paulimatrices. De eis dat de bandgap sluit in het punt (k_{x_0}, k_{y_0}) komt overeen met $\widehat{H}(k_{x_0}, k_{y_0}) = 0$. Dit kan enkel wanneer de functie die als coëfficiënt optreedt bij elke Paulimatrix, nul is, voor juist gekozen parameters. Hieruit

volgt als snel dat de gapsluitingspunten, met hun specifieke parameters, gegeven zijn door

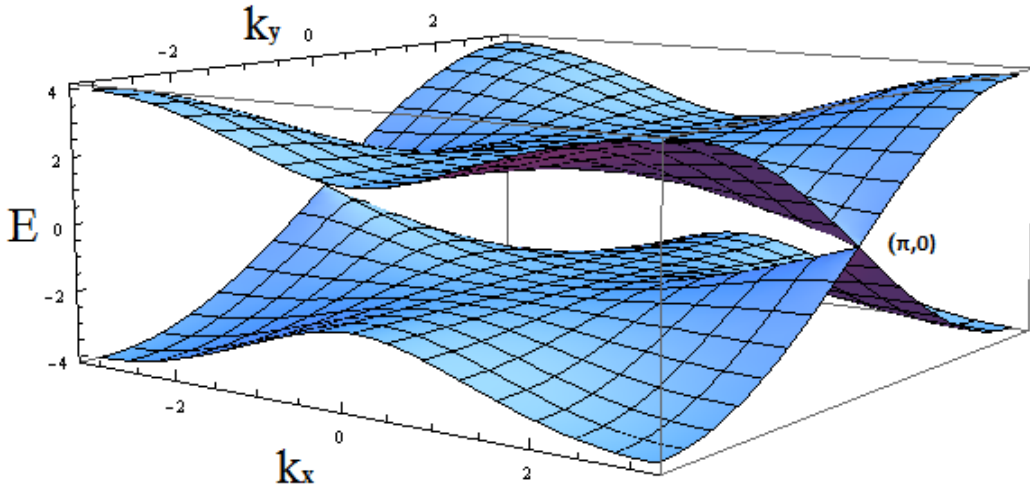
$$\begin{cases} (0,0) & \longrightarrow t_1 + t_2 + \gamma = 0 \\ (\pi,0) & \longrightarrow t_1 - t_2 + \gamma = 0 \\ (0,\pi) & \longrightarrow t_1 + t_2 - \gamma = 0 \\ (\pi,\pi) & \longrightarrow t_1 - t_2 - \gamma = 0 \end{cases} \quad (2.84)$$

Deze relaties tussen de drie verschillende bindingsparameters t_1 en t_2 in de x-richting en γ in de y-richting, geven weer wanneer er in het bandspectrum een gap zal plaatsvinden en wanneer niet. Wat meteen opvalt is dat de eis $t_1 = \pm t_2$ van het ééndimensionale geval niet meer moet voldoen om de gap te doen sluiten. Hieruit volgt dat de fase waarin er gapsluiting voorkomt een groter gebied in de parameter ruimte zou kunnen beschrijven.

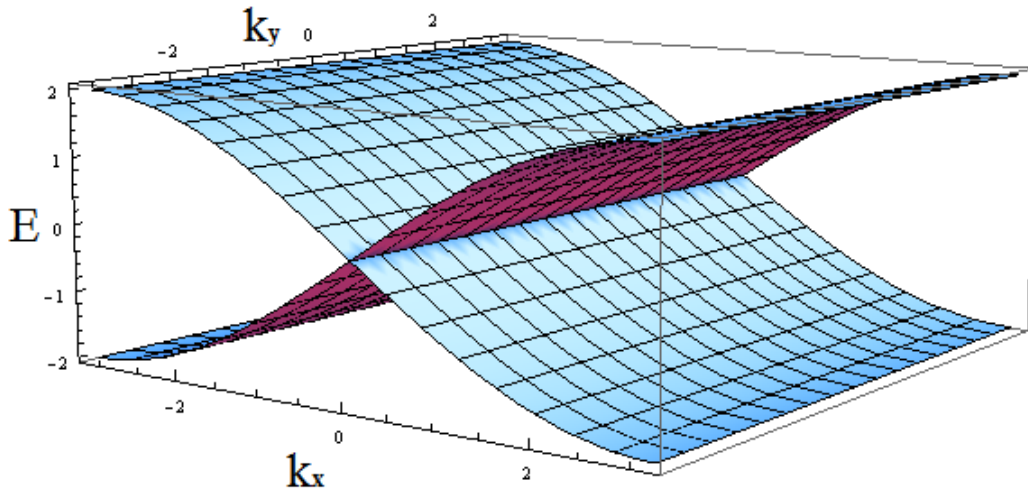
Deze sluitingspunten kunnen grafisch gecontroleerd worden door de energie te plotten in functie van k_x en k_y . De uitdrukking voor de totale energie in functie van deze 2 continue parameters, wordt analytisch bepaald door de matrixnotatie van de totale hamiltoniaan (2.77) te diagonaliseren, met als resultaat

$$E = \pm \sqrt{|t_1 + t_2 e^{ik_x} + \gamma \cos(k_y)|^2 + \gamma^2 \sin(k_y)^2}. \quad (2.85)$$

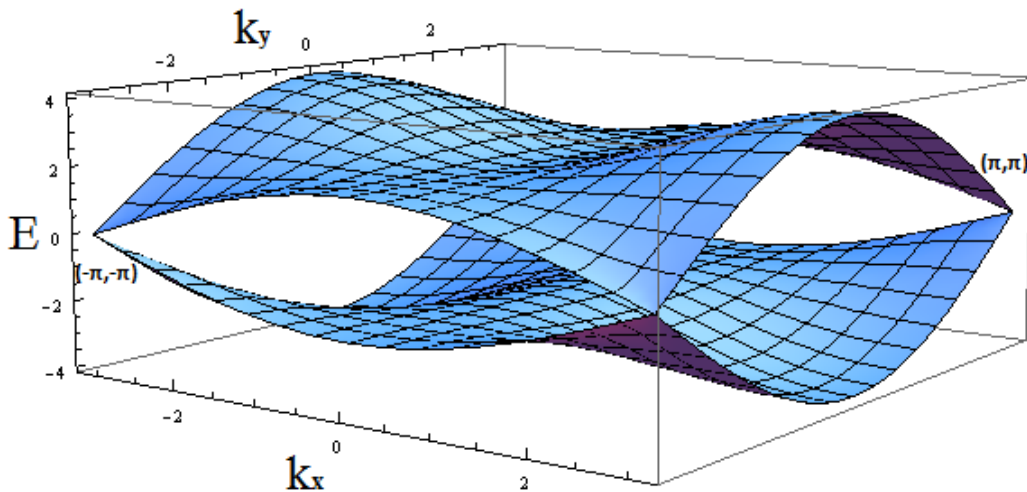
Als voorbeeld wordt $t_1 = 1$ en $t_2 = -1$ beschouwd, de voorspelde gapsluitingspunten zullen zich voordoen bij $\gamma = 0, 2$ en -2 . Dit specifiek geval leent zich goed voor controle omdat wanneer $\gamma = 0$, het ééndimensionale geval zich zal voordoen in de k_x -richting. De bovenstaande uitdrukking wordt geplot in de parameters voor de voorspelde sluitingspunten bij $t_1 = -t_2 = 1$.



Figuur 2.12: Bandenstructuur van de strip in de eerste Brioullin zone van (k_x, k_y) . De gebruikte parameters zijn $t_1 = 1$, $t_2 = -1$ en $\gamma = -2$. De gap sluit op $(\pi, 0)$ en $(-\pi, 0)$, wat de periodiciteit in de k_x -richting weergeeft.



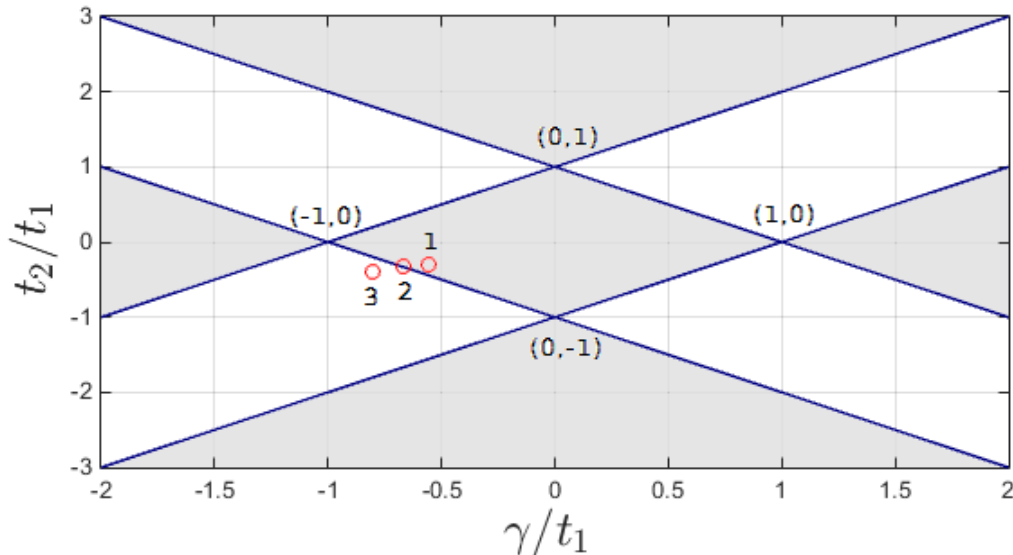
Figuur 2.13: Bandenstructuur van de strip in de eerste Brioullin zone van (k_x, k_y) . De gebruikte parameters zijn $t_1 = 1$, $t_2 = -1$ en $\gamma = 0$. Deze laatste wil zeggen dat er geen interactie is tussen de onderlinge parallelle ketens. Het geval herleidt zich dus tot dat van de ééndimensionale keten, maar dan oneindig doorgetrokken in de k_y -richting.



Figuur 2.14: Bandenstructuur van de strip in de eerste Brioullin zone van (k_x, k_y) . De gebruikte parameters zijn $t_1 = 1$, $t_2 = -1$ en $\gamma = 2$. De gap sluit op het punt (π, π) . Dit punt is periodisch in beide richtingen.

Zoals vermeld tonen de relaties (2.84) dat er niet enkel gapsluitingspunten optreden wanneer aan de stricte $t_1 = -t_2$ eis voldaan is. Dit is goed nieuws omdat het de mogelijke topologisch fase robuuster maakt en deze voor een groter gebied in de parameter ruimte geldt.

De betrekkingen tussen de verschillende bindingsparameters (2.84) kunnen weergegeven worden in een fasediagram. Uit zo'n diagram kan heel wat informatie worden afgeleid over de evolutie van het systeem in de parameter ruimte van de hamiltoniaan. Onderstaande figuur is het fasediagram gevormd door de vergelijkingen (2.84)



Figuur 2.15: Het fasediagram dat de betrekkingen (2.84) weergeeft. Hierop is te zien dat er twee gebieden onderscheiden kunnen worden. De aangeduide punten zijn de punten in de parameter ruimte die gebruikt zullen worden om te identificeren welk gebied het topologische is.

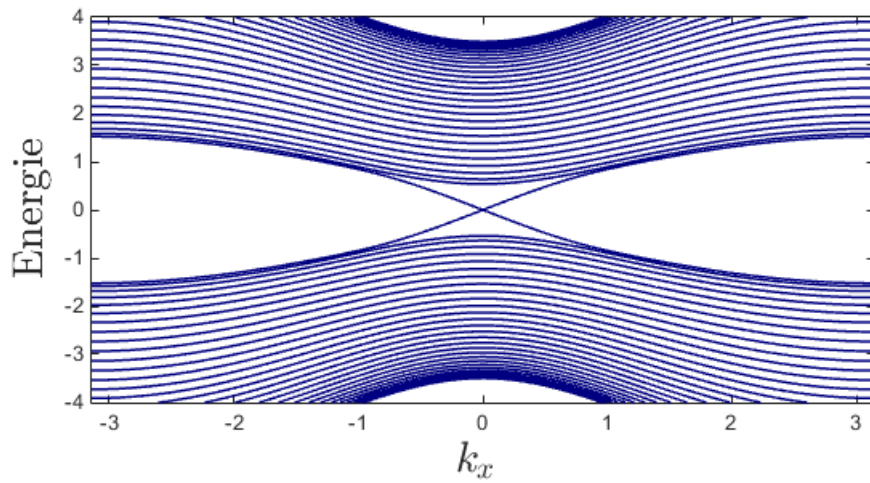
Op het diagram stelt elke rechte een betrekking voor van (2.84) en het valt meteen op dat er twee verschillende gebieden te onderscheiden zijn die mogelijk overeenkomen met verschillende fases. Telkens wanneer er een rechte gesneden wordt op het fasediagram, zal de bandgap sluiten of openen. Het afgebakende gebied kan dus enkel verlaten worden wanneer de bandgap sluit, dit is een eerste aanduiding dat dit gebied alvast overeen zou komen met de topologische fase van het systeem. Het grijsgekleurde gebied is het gebied waarin vanuit het afgesloten gebied kan geraakt worden door een even aantal rechten te snijden. Later zal blijken dat de grijze gebieden punten bevatten die overeenkomen met systemen waarbij er een bandsluitingspunt aanwezig is.

Om nu te controleren of de scheiding tussen de gebieden op het fasediagram inderdaad de grens vormt tussen de topologisch en triviale fase, en om te identificeren welk gebied overeenkomt met het topologische gebied, worden de bindingsparameters t_1 , t_2 en γ zo gekozen dat ze rond de scheiding van de twee verschillende gebieden liggen. Specifiek worden t_2 en γ gelijk gesteld aan resp. 1 en 2. Het is de parameter t_1 die gevarieerd wordt rond het gapsluitingspunt dat bepaald is door de eerste betrekking van (2.84),

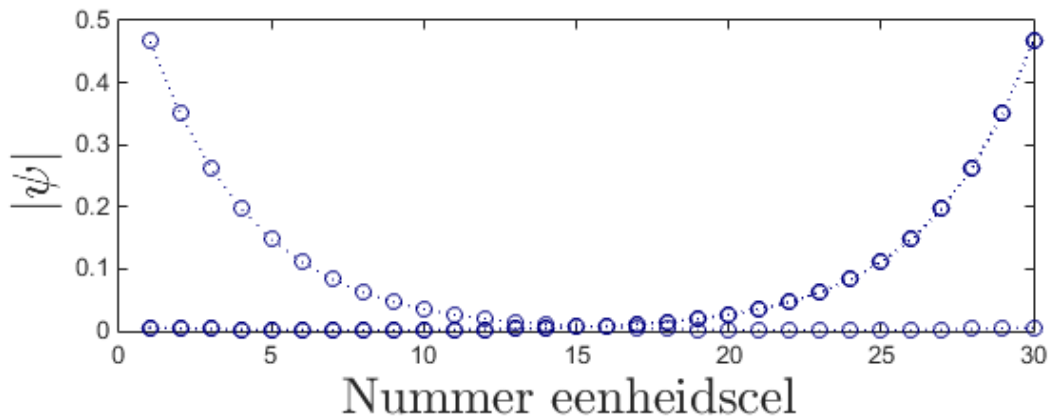
$$(k_x, k_y) = (0, 0) \longrightarrow t_1 = -3 \tag{2.86}$$

De drie punten in de parameter ruimte die onderzocht worden zijn tevens aangeduid op het fasediagram in figuur (2.15). Er zal voor elk punt gekeken worden naar de bandenstructuur van de eindige strip. Deze wordt bekomen door voor de gegeven bindingsparameters de matrixnotatie van de hamiltoniaan van de eindige strip (2.74) te diagonaliseren voor een bepaald aantal eenheidscellen in de y-richting, N . Deze bandenstructuur bevat dan al dan niet een gapsluiting. Wanneer er een gapsluiting optreedt, wordt bovendien onderzocht of deze correspondeert met randtoestanden door analoog aan het geval met de eindige ééndimensionale keten de waarschijnlijkheidsverdeling te plotten voor de gapsluitingsenergie.

Het eerste punt dat onderzocht wordt bevindt zich in het grijze gebied van het fasediagram, aangeduid met 1. Het stelt een systeem voor met als bindingsparameters $t_2 = 1$, $\gamma = 2$ en $t_1 = -2.5$.



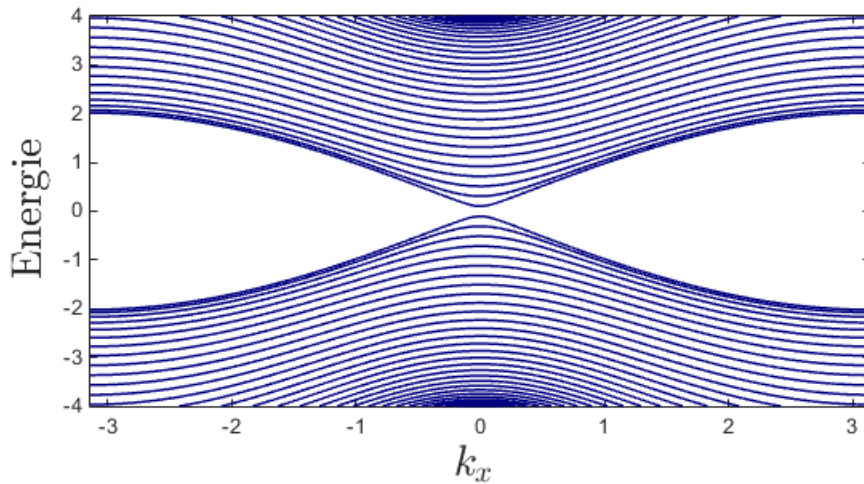
Figuur 2.16: Bandenstructuur in de x-richting van een eindige strip met $N = 30$ waarbij de parameters gegeven zijn door $t_2 = 1$, $\gamma = 2$ en $t_1 = -2.5$.



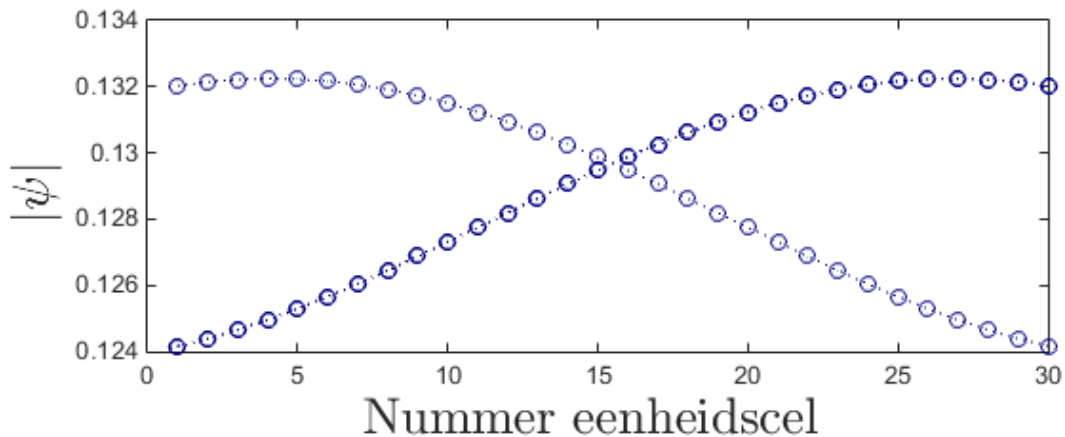
Figuur 2.17: Een grafiek die de waarschijnlijkheid weergeeft van toestanden bij de sluitingsenergie $E = 0$.

Op de eerste figuur is duidelijk te zien dat er sluiting van de bandgap optreedt bij $k_x = 0$. Bovendien blijkt uit de waarschijnlijkheidsverdeling van de gapsluitingsenergie van de tweede figuur dat deze energie met randtoestanden overeenkomt. De randtoestanden zijn echter wel minder sterk gelokaliseerd dan bij het ééndimensionale geval. Er is dus sprake van een hybridisatie van de randtoestanden, wat wellicht te verklaren is door het feit dat de bindingsparameter waarden dicht bij het gapsluitingspunt gekozen zijn.

Het volgende punt dat onderzocht wordt is punt 2 op het fasediagram. De bindingsparameters worden zo gekozen dat t_1 en γ dezelfde waarde hebben als het vorige geval én waarbij ze voldoen aan de eerste relatie van (2.84), zodat $t_1 = -3$. Dit punt ligt dus op de scheiding tussen de twee gebieden en zou dus aanleiding moeten geven tot het sluiten van de bandgap.



Figuur 2.18: Bandenstructuur in de x-richting van een eindige strip met $N = 30$ waarbij de parameters gegeven zijn door $t_2 = 1$, $\gamma = 2$ en $t_1 = -3$. Het valt meteen op dat er zich geen gapsluiting meer voordoet, iets wat in eerste instantie wel verwacht werd.

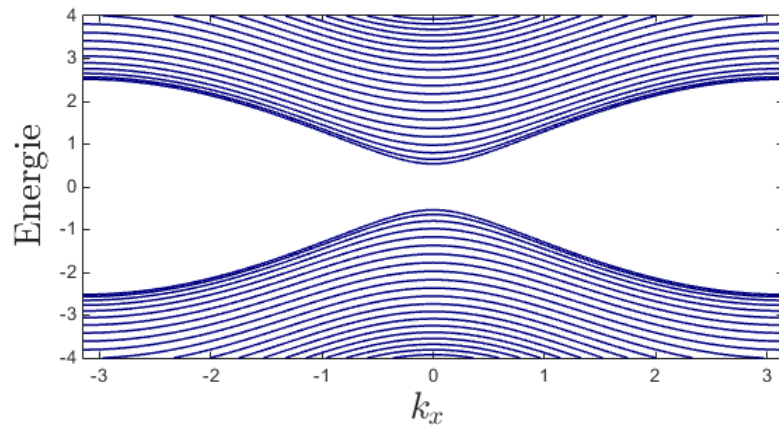


Figuur 2.19: Een grafiek die de waarschijnlijkheid weergeeft van toestanden bij de sluitingsenergie $E = 0$. Het is onmiddellijk duidelijk dat er in grote mate hybridisatie optreedt.

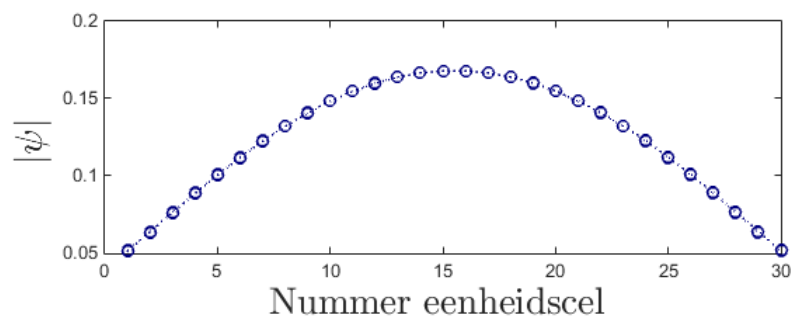
Deze grafieken tonen duidelijk dat er geen bandgap meer optreedt, terwijl dit in eerste instantie wel wordt verwacht mits de parameters voldoen aan de eerste vergelijking van (2.84). Het afwijkend resultaat kan verklaard worden door het feit dat er met een eindig systeem gewerkt wordt. Hierdoor ontstaan er afwijkingen van de randwaarden van t_1 door dat er hybridisatie optreedt van de randtoestanden, zoals te zien op figuur 2.19. Uit de tweede grafiek valt ook meteen op dat de randtoestanden nog meer hybridisatie vertonen, zelfs in die mate dat er bijna niet meer over randtoestanden gesproken kan worden.

Voor het eindige systeem dat hier gebruikt wordt, $N = 30$, treedt er efficiënt gapsluiting op bij $t_1 \cong 2.65$. Wanneer het eindige systeem vergroot wordt, naar bijvoorbeeld $N = 120$, dan verplaatst het gapsluitingspunt in de t_1 -ruimte zich dichter naar de theoretische waarde $t_1 = -3$.

Het laatste punt, punt 3 op het fasediagram, wordt zo gekozen dat het punt buiten het grijze gebied valt. Wederom worden t_2 en γ dezelfde waarde toegekend als de vorige gevallen, deze keer wordt $t_1 = -3.5$ gekozen, zodat het punt inderdaad buiten het grijze gebied valt. Wat verwacht wordt is dat het systeem beschreven door deze parameters geen bandsluiting meer zal hebben en bovendien geen randtoestanden meer zal vertonen.



Figuur 2.20: Bandenstructuur in de x-richting van een eindige strip met $N = 30$ waarbij de parameters gegeven zijn door $t_2 = 1$, $\gamma = 2$ en $t_1 = -3.5$.



Figuur 2.21: Bandenstructuur in de x-richting van een eindige strip met $N = 30$ waarbij de parameters gegeven zijn door $t_2 = 1$, $\gamma = 2$ en $t_1 = -3.5$.

Deze figuren tonen duidelijk dat er geen bandgap meer optreedt en dat er door hybridisatie geen sprake meer is van randtoestanden.

De evolutie van de bandenstructuur van het tweedimensionale modelsysteem rond andere overgangsfases op het fase-diagram verloopt gelijkaardig, afhankelijk van waar naar waar de overgang genomen wordt. Hierdoor is het duidelijk geworden dat de twee gebieden op het fase-diagram inderdaad overeenstemmen met twee fundamenteel verschillende fases van het systeem.

Door bovendien de overeenstemmende waarschijnlijkheidsverdeling te bestuderen, blijkt dat punten op het fase-diagram die binnen het grijze gebied liggen, overeenkomen met systemen waarbij er randtoestanden optreden. Dit wil zeggen dat deze systemen zich in de topologische fase bevinden. Punten die zich buiten dit grijze gebied bevinden, corresponderen met systemen die zich in de triviale fase bevinden.

Op de scheiding tussen de twee gebieden bevindt zich het sluiten van de bandgap. Dit wil zeggen dat om van de ene naar de andere fase over te gaan, dat de bandgap moet sluiten, waardoor de randtoestanden dus beschermd zijn.

2.4 Uitbreiding naar spin 1/2-deeltjes

Bij alle modelsystemen die in deze thesis behandeld zijn, werd expliciet gewerkt met spinloze ladingsdragers. Dit levert voor het praktisch realiseren van topologische isolatie in materialen weinig bijdrage omdat bij realistische systemen de ladingsdragers elektronen zijn, spin 1/2-deeltjes.

De uitbreiding naar deze realistische modellen licht echter voor de hand en de werkwijze is analoog. Voor het tweedimensionale strip systeem van vorige sectie zal het voldoende zijn om te vertrekken van een systeem waarbij elke toestand, zoals voorheen beschouwd, nu wordt opgedeeld in twee verschillende toestanden, één voor spin op en één voor spin neer. De modelhamiltoniaan die zo'n systeem beschrijft zal tijdsomkeer symmetrisch zijn, deze symmetrie zal tevens ook diegene zijn, die voor de beschermde toestanden zal zorgen, waarover in de inleiding reeds over verteld werd.

Hoofdstuk 3

Conclusie

Topologische isolatie in materialen is een exotisch verschijnsel dat pas sinds enkele jaren met veel interesse onderzocht wordt. Toch toont deze thesis aan dat zelfs in uiterst simpele modellen topologische isolatie verkrijgbaar is. Door de hamiltoniaan op te stellen en deze te laten voldoen aan bepaalde symmetrie eigenschappen, zal er een topologische fase onderscheidbaar zijn. Deze fase is beschermd door een symmetrie waardoor het een robuuste toestand van het systeem vormt.

Zo werd in het eerste geval opgelegd dat de onsite potentiaal van de atomen op een ééndimensionale keten gelijk moet zijn. Deze symmetrie zorgt voor het optreden van topologische isolatie in een gebied waarbij de bindingsparameters goed gekozen worden. Dit gebied zal zich niet meer voordoen wanneer deze symmetrie gebroken wordt.

In het tweede modelsysteem werd er een dimensie hoger gegaan door meerdere ééndimensionale ketens parallel te plaatsen en een koppeling in te voeren. Door deze koppeling zo te kiezen dat de modelhamiltoniaan voldeed aan inversie symmetrie, kon er weer een gebied afgebakend worden waarin topologische isolatie optreedt.

Om echter realistische modellen te beschouwen moet spin in acht worden genomen, met oog op het feit dat elektrische geleiding in materialen gebeurt door elektronen, spin $1/2$ -deeltjes. In de laatste sectie van vorige hoofdstuk werd reeds een aanleiding gegeven om zulke modellen te verwezenlijken. Het zijn deze modellen, die rekening houden met het niet nul zijn van de spin, waar het theoretische onderzoek op topologische isolatoren op berusten.

Appendix I

Om een bruikbare vorm van de hamiltoniaan van de oneindige keten te bekomen wordt gebruik gemaakt van de periodische randvoorwaarde die het oneindige karakter van de keten in rekening neemt. Hierdoor kunnen transformaties (2.36) en (2.37) (en hun complex toegevoegden) gebruikt worden. Wat in feite gedaan wordt is een Fourier Transformatie van de oorspronkelijke coördinaten naar normaalcoördinaten.

Vertrekkend van de eerste 2 termen uit vergelijking (2.38), mits de overige 2 termen de complex toegevoegden zijn en de berekening volledig analoog gebeurt.

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \sum_{n=1}^{\infty} t_1 c_{B_n}^\dagger c_{A_n} + t_2 c_{A_{n+1}}^\dagger c_{B_n} \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \left[t_1 \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_{B_k}^\dagger e^{-ikn} \cdot \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} c_{A_k} e^{-ik'n} + t_2 \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_{A_k}^\dagger e^{-ik(n+1)} \cdot \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} c_{B_{k'}} e^{-ik'n} \right] \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{t_1}{N} \sum_{k,k'} c_{B_k}^\dagger c_{A_{k'}} e^{i(k'-k)n} + \frac{t_2}{N} \sum_{k,k'} c_{A_k}^\dagger c_{B_{k'}} e^{i(k'-k)n} e^{-ik} \right] \\
&= \frac{t_1}{N} \sum_{k,k'} \left(c_{B_k}^\dagger c_{A_{k'}} \sum_n e^{i(k'-k)n} \right) + \frac{t_2}{N} \sum_{k,k'} \left(c_{A_k}^\dagger c_{B_{k'}} e^{-ik} \sum_n e^{i(k'-k)n} \right) \\
&= \frac{t_1}{N} \sum_{k,k'} \left(c_{B_k}^\dagger c_{A_{k'}} \delta_{k,k'} N \right) + \frac{t_2}{N} \sum_{k,k'} \left(c_{A_k}^\dagger c_{B_{k'}} e^{-ik} \delta_{k',k} N \right) \\
&= t_1 c_{B_k}^\dagger c_{A_k} + c_{A_k}^\dagger c_{B_k} e^{-ik}
\end{aligned}$$

Voor het hermitische toegevoegde deel van de hamiltoniaan wordt volledig analoog tewerk gegaan. De gebruikte transformaties zijn echter de complex toegevoegde van degene hierboven gebruikt.

In beide afleidingen wordt expliciet gebruik gemaakt van de som-identiteit

$$\sum_n e^{i(k-k')n} = \delta_{k,k'} N,$$

iets wat eenvoudig bewezen kan worden door de gevallen $k = k'$ en $k \neq k'$ te beschouwen en in achtung te nemen dat $k = \frac{2\pi}{N}p$, met p een geheel getal.

Appendix II

Gebruik makend van de eigenschappen van creatie- en annihilatieoperatoren wordt $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ met

$$H = \sum_{i=1}^{\infty} (t_1 c_{B_i}^\dagger c_{A_i} + t_2 c_{A_{i+1}}^\dagger c_{B_i} + h.c.)$$

$$|\Psi\rangle = \sum_n (\psi_{A_n} c_{A_n}^\dagger + \psi_{B_n} c_{B_n}^\dagger) |0\rangle ,$$

als volgt berekend:

$$\begin{aligned} H|\Psi\rangle &= \sum_{i=1}^{\infty} (t_1 c_{B_i}^\dagger c_{A_i} + t_2 c_{A_{i+1}}^\dagger c_{B_i} + t_1 c_{A_i}^\dagger c_{B_i} + t_2 c_{B_i}^\dagger c_{A_{i+1}}) \cdot \sum_{j=1}^{\infty} (\psi_{A_n} c_{A_n}^\dagger + \psi_{B_n} c_{B_n}^\dagger) |0\rangle \\ &= \sum_{i,j}^{\infty} (t_1 c_{B_i}^\dagger c_{A_i} \psi_{A_n} c_{A_n}^\dagger + t_1 c_{B_i}^\dagger c_{A_i} \psi_{B_n} c_{B_n}^\dagger + t_2 c_{A_{i+1}}^\dagger c_{B_i} \psi_{A_n} c_{A_n}^\dagger + t_2 c_{A_{i+1}}^\dagger c_{B_i} \psi_{B_n} c_{B_n}^\dagger + \dots) \\ &\quad (\dots + t_1 c_{A_i}^\dagger c_{B_i} \psi_{A_n} c_{A_n}^\dagger + t_1 c_{A_i}^\dagger c_{B_i} \psi_{B_n} c_{B_n}^\dagger + t_2 c_{B_i}^\dagger c_{A_{i+1}} \psi_{A_n} c_{A_n}^\dagger + t_2 c_{B_i}^\dagger c_{A_{i+1}} \psi_{B_n} c_{B_n}^\dagger) |0\rangle \\ &= \sum_{i,j}^{\infty} (t_1 \psi_{A_j} c_{B_i}^\dagger \delta_{ij} - t_2 c_{A_{i+1}}^\dagger \psi_{A_j} c_{A_j}^\dagger c_{B_i} - t_1 c_{A_i}^\dagger \psi_{A_j} c_{A_j}^\dagger c_{B_i} + t_2 \psi_{A_j} c_{B_i}^\dagger \delta_{i+1,j} - \dots) \\ &\quad (\dots - t_1 c_{B_i} \psi_{B_j} c_{B_j}^\dagger c_{A_i} + t_2 c_{A_{i+1}}^\dagger \psi_{B_j} \delta_{ij} + t_1 c_{A_i}^\dagger \psi_{B_j} \delta_{ij} - t_2 c_{B_i}^\dagger \psi_{B_j} c_{B_j}^\dagger c_{A_{i+1}}) |0\rangle \\ &= \sum_{i=1}^{\infty} (t_1 \psi_{A_i} c_{B_i}^\dagger + t_2 c_{B_i}^\dagger \psi_{A_{i+1}} + t_2 c_{A_{i+1}}^\dagger \psi_{B_i} + t_1 c_{A_i}^\dagger \psi_{B_i}) |0\rangle \\ &= \sum_{i=1}^{\infty} (t_1 \psi_{A_i} c_{B_i}^\dagger + t_2 c_{B_i}^\dagger \psi_{A_{i+1}} + t_2 c_{A_i}^\dagger \psi_{B_{i-1}} + t_1 c_{A_i}^\dagger \psi_{B_i}) |0\rangle \\ &\equiv E|\Psi\rangle = \sum_n (\psi_{A_n} c_{A_n}^\dagger + \psi_{B_n} c_{B_n}^\dagger) |0\rangle \end{aligned}$$

Identificatie met de laatste gelijkheid geeft

$$E\psi_{A_i} = t_2 \psi_{B_{i-1}} + t_1 \psi_{B_i}$$

$$E\psi_{B_i} = t_1 \psi_{A_i} + t_2 \psi_{A_{i+1}}$$

Omdat geist wordt dat $\psi_{B_i} = 0$, volgt uiteindelijk dat

$$\psi_{A_{i+1}} = -\frac{t_1}{t_2} \psi_{A_i} = \left(-\frac{t_1}{t_2}\right)^i \psi_{A_1} .$$

Bibliografie

- [1] Pankratov, O.A.; Pakhomov, S.V.; Volkov, B.A. (January 1987). "Supersymmetry in heterojunctions: Band-inverting contact on the basis of $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ and $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ". *Solid State Communications* 61 (2): 93–96.
- [2] König, Markus; Wiedmann, Steffen; Brüne, Christoph; Roth, Andreas; Buhmann, Hartmut; Molenkamp, Laurens W.; Qi, Xiao-Liang; Zhang, Shou-Cheng (2007-11-02). "Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells". *Science* 318 (5851): 766–770
- [3] Hsieh, David; Dong Qian, Andrew L. Wray, Yuqi Xia, Yusan Hor, Robert Cava and M. Zahid Hasan (2008). "A Topological Dirac insulator in a quantum spin Hall phase". *Nature* 452 (9): 970–974.
- [4] Hasan, M. Zahid; Kane, Charles L. (2010). "Topological Insulators". *Review of Modern Physics* 82 (4): 3045.