

**UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI NAPOLI
“FEDERICO II”**



Scuola Politecnica e delle Scienze di Base

Area Didattica di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali

Dipartimento di Fisica “Ettore Pancini”

Laurea Triennale in Fisica

**Descrizione di isolanti topologici a partire
dall’equazione di Dirac modificata**

Relatori:

Prof. Carmine Antonio Perroni

Candidato:

Agostino Gargiulo

Matr. N85001069

Anno Accademico 2019/2020

Indice

Introduzione	3
1 L'equazione di Dirac modificata	6
1.1 L'equazione di Dirac	6
1.2 Soluzioni per stati legati	8
1.2.1 Soluzione di Jackiw-Rebbi nel caso unidimensionale	8
1.2.2 Caso bidimensionale	10
1.3 La correzione quadratica all'equazione di Dirac	12
1.4 Stati legati per l'equazione di Dirac modificata	13
1.4.1 Caso unidimensionale	13
1.4.2 Caso bidimensionale: stati di bordo elicoidali	14
1.5 Invariante topologico Z_2 e diagramma di fase dell'equazione di Dirac modificata	16
2 Modello per il quantum spin Hall effect	19
2.1 Il modello di Kane e Mele	19
2.2 La stabilità degli stati di bordo	22
3 Predizione e realizzazione dello stato QSH	25
3.1 Modello per gli isolanti topologici 2D in quantum wells di HgTe/CdTe	25
3.2 Soluzione esatta degli stati di bordo per il modello Bernevig-Hughes-Zhang	29
3.3 Misure sperimentali	32
Conclusioni	34
Bibliografia	35

Introduzione

La fisica dello stato solido, delle particelle e la fisica matematica rappresentano tre rami fondamentali della fisica moderna. Negli ultimi decenni, l'unione di idee provenienti da questi rami ha portato a un nuovo paradigma, l'era della fisica della materia condensata topologica. La nozione di struttura a bande, tipica della fisica dello stato solido, unitamente a concetti topologici, legati al campo della fisica matematica, consente di fornire una classificazione topologica dei materiali. Il risultato è l'emergere di sistemi elettronici topologicamente non banali descritti da equazioni simili all'equazione di Dirac. Anche se è noto che un materiale può essere classificato, in base alla sua struttura elettronica a bande, come isolante o come metallo, rispettivamente a grande o bassa resistenza elettrica, nel 2007 è stato scoperto un materiale che non rientra in questa classificazione, il primo isolante topologico: un isolante nel *bulk*, ma conduttivo sugli *edge*.

Per essere più precisi, l'avvento della fisica della materia condensata topologica può essere fatto risalire al 1980, quando von Klitzing e collaboratori scoprirono sperimentalmente l'effetto Hall quantistico (*Quantum Hall*, QH). Nel QH, il *bulk* di un campione bidimensionale, soggetto a un forte campo magnetico perpendicolare, è completamente isolante. La corrente elettrica è trasportata solamente lungo i bordi del campione e la sua direzione su ogni bordo è fissata dalla direzione del campo magnetico agente sul sistema. La quantizzazione della conduttanza Hall, che può solo avere valori interi in unità di e^2/h , può essere spiegata solo attraverso il fatto che tale stato della materia è topologicamente invariante, e non dipende dai dettagli del materiale. Il comportamento di questo stato della materia dipende quindi solo dalla sua topologia e non dalla sua specifica geometria. Sorprendentemente, la conduttanza quantizzata misurata è quasi completamente insensibile alla presenza di impurità e disordine.

Matematicamente si introduce il concetto di invarianza topologica per classificare diversi oggetti in classi. La superficie di una sfera è topologicamente equivalente alla superficie di un ellissoide, in quanto le due superfici possono essere deformate l'una nell'altra con continuità. Allo stesso modo la superficie di una sfera non è topologicamente equivalente a quella di un toro. In fisica, quantità come la conduttanza di Hall hanno un'origine topologica, e rimangono invariate sotto piccole modifiche geometriche del campione. Il

concetto matematico di classificazione topologica può essere applicato intuitivamente a sistemi di materia condensata dotati di *gap* energetico. Si può infatti considerare un'hamiltoniana di un sistema di più particelle, caratterizzata da un *gap* di energia che separa lo stato fondamentale da quelli eccitati. In questo caso, una deformazione regolare può essere definita come una modifica dell'hamiltoniana che non annulla il *gap* di energia. Questo concetto topologico può essere correttamente applicato a stati fisici dotati di *gap* energetici, come isolanti o semiconduttori.

Subito dopo la scoperta dell'effetto QH, i fisici hanno iniziato a chiedersi se la rottura della simmetria di inversione temporale, che nei sistemi QH è determinata dal campo magnetico, sia necessaria per generare uno stato topologicamente non banale. Diversi anni dopo, ci fu una svolta ad opera di Kane e Mele, che generalizzarono un modello di grafene con accoppiamento spin-orbita, fornendo la base teorica per gli isolanti topologici bidimensionali. L'accoppiamento spin-orbita rispetta la simmetria temporale e agisce come due campi magnetici opposti per gli elettroni a spin up e spin down. Stati di bordo conduttivi compaiono alla frontiera del sistema. Tuttavia, a causa della simmetria per *time reversal*, ora si realizzano coppie di Kramers, con elettroni di spin opposti che si propagano in direzioni opposte. Fondamentalmente, a causa del teorema di Kramers, questi stati di *edge* sono protetti dal *backscattering* fintanto che la simmetria temporale è preservata, dando così origine a una fase topologica protetta dalla simmetria. Questi stati di bordo sono chiamati elicoidali, perché lo spin dell'elettrone è bloccato alla direzione di propagazione in modo tale da essere autostati degli operatori di elicità, cioè la proiezione dello spin sul momento. Gli stati di bordo danno origine al cosiddetto effetto spin-Hall quantistico (*Quantum Spin Hall*, QSH).

Sfortunatamente i *gap* energetici causati dall'accoppiamento spin-orbita nel grafene risultano insignificanti. Bernevig, Hughes e Zhang predirono con successo l'esistenza del primo isolante topologico in 2 dimensioni (2D), realizzato poi sperimentalmente nel 2007 nelle *quantum wells* di HgTe/CdTe. Tale scoperta è da considerarsi tra le più importanti degli ultimi venti anni in fisica della materia condensata e ha suscitato immediatamente un enorme interesse.

Lo scopo di questo lavoro è quello di descrivere un isolante topologico 2D a partire dallo studio dell'equazione di Dirac modificata.

Nel capitolo 1, si introdurrà l'equazione di Dirac, considerandone le soluzioni per stati legati di Jackiw-Rebbi. Verrà poi presentata l'equazione di Dirac modificata[6], topologicamente distinta, e saranno mostrate le soluzioni di quest'ultima per stati legati. Infine si introdurrà l'invariante topologico \mathbb{Z}_2 [1], utile a distinguere fasi della materia topologicamente banali e non banali.

Nel capitolo 2, si introdurrà il modello di Kane e Mele[2] per l'effetto spin-Hall quantistico, che prevede termini di accoppiamento spin-orbita in un reticolo di grafene. Sarà poi data una giustificazione matematica della robustezza degli stati di bordo[4].

Nel capitolo 3, sarà presentato il modello di Bernevig, Hughes e Zhang che prevede l'esistenza del primo isolante topologico 2D, con un'equazione analoga all'equazione modificata di Dirac. Saranno poi fornite le soluzioni esatte di questo modello per stati di bordo, ottenute da Zhou e collaboratori[7]. Infine saranno presentati alcuni risultati sperimentali, ottenuti da un gruppo di fisici guidato da Molenkamp[3], sulle *quantum wells* di HgTe/CdTe.

Capitolo 1

L'equazione di Dirac modificata

L'equazione di Dirac è la chiave per comprendere gli isolanti topologici. Una correzione quadratica all'equazione la rende topologicamente distinta. La soluzione per stati legati alla frontiera riflette la topologia della struttura a bande del sistema. L'indice \mathbb{Z}_2 mostra la distinzione tra isolanti ordinari e isolanti topologici.

1.1 L'equazione di Dirac

Nel 1928 Paul A. M. Dirac formulò un'equazione d'onda per descrivere particelle elementari a spin $\frac{1}{2}$, consistente con i principi sia della meccanica quantistica che della relatività ristretta:

$$\mathbf{H} = c\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\alpha} + mc^2\boldsymbol{\beta}, \quad (1.1)$$

dove m è la massa a riposo della particella e c è la velocità della luce. $\boldsymbol{\alpha}_i$ e $\boldsymbol{\beta}$ non sono semplici numeri complessi, ma matrici - dette di Dirac - che soddisfano le seguenti relazioni

$$\boldsymbol{\alpha}_i^2 = \boldsymbol{\beta}^2 = \mathbf{I}, \quad (1.2)$$

$$\boldsymbol{\alpha}_i\boldsymbol{\alpha}_j = -\boldsymbol{\alpha}_j\boldsymbol{\alpha}_i, \quad (1.3)$$

$$\boldsymbol{\alpha}_i\boldsymbol{\beta} = -\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\alpha}_i. \quad (1.4)$$

In spazi uni- e bidimensionali, queste devono essere almeno matrici 2×2 .

Le matrici di Pauli $\boldsymbol{\sigma}_i$ ($i = x, y, z$) soddisfano tutte queste relazioni, infatti

$$\{\boldsymbol{\sigma}_i, \boldsymbol{\sigma}_j\} = 2\delta_{ij}\mathbf{I}. \quad (1.5)$$

Esse sono

$$\boldsymbol{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.6)$$

In uno spazio 1D, le matrici di Dirac sono due delle tre matrici di Pauli, ad esempio

$$\boldsymbol{\alpha}_x = \boldsymbol{\sigma}_x, \quad \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\sigma}_z. \quad (1.7)$$

In 2D, hanno la stessa forma delle matrici di Pauli

$$\boldsymbol{\alpha}_x = \boldsymbol{\sigma}_x, \quad \boldsymbol{\alpha}_y = \boldsymbol{\sigma}_y, \quad \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\sigma}_z. \quad (1.8)$$

In 3D, non possiamo trovare più di 3 matrici 2×2 che soddisfino le relazioni di anticommutazione. Per questo le matrici di Dirac sono ora 4×4 , e possono essere espresse in termini delle matrici di Pauli

$$\boldsymbol{\alpha}_i = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \boldsymbol{\sigma}_i \\ \boldsymbol{\sigma}_i & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}_0 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\boldsymbol{\sigma}_0 \end{pmatrix}, \quad (1.9)$$

dove $\boldsymbol{\sigma}_0 \equiv \mathbf{I}_2$.

Da questa equazione, la relazione relativistica di Einstein tra energia e impulso sarà automaticamente soluzione della seguente:

$$E^2 = m^2 c^4 + p^2 c^2. \quad (1.10)$$

In tre dimensioni, ci sono due soluzioni per energia positiva E_+ e due soluzioni per energia negativa E_- ,

$$E_{\pm} = \pm \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2}. \quad (1.11)$$

L'equazione di Dirac prevede quindi l'esistenza di antiparticelle, ad esempio particelle con energia o massa negativa, e predice la scoperta del positrone, l'antiparticella dell'elettrone. Essa può descrivere il moto di un elettrone, ad energia positiva, a cui corrispondono due soluzioni, una per spin up e una per spin down; analogamente, per il positrone abbiamo altre due soluzioni ad energia negativa.

Sotto una trasformazione della massa $m \rightarrow -m$, si trova che l'equazione rimane invariante se sostituiamo $\boldsymbol{\beta} \rightarrow -\boldsymbol{\beta}$, che soddisfa ugualmente le relazioni richieste in (1.2) e (1.4). Ciò riflette la simmetria dell'equazione di Dirac tra particelle ad energia positiva e negativa: non c'è distinzione topologica tra particelle a massa positiva o negativa.

1.2 Soluzioni per stati legati

1.2.1 Soluzione di Jackiw-Rebbi nel caso unidimensionale

Una possibile relazione tra l'equazione di Dirac e un isolante topologico è rivelata dalla soluzione di stato legato all'interfaccia tra regioni con masse positiva e negativa. Per semplicità, consideriamo prima un esempio in caso 1D, per cui

$$\mathbf{H}_{1D}(x) = vp_x\boldsymbol{\sigma}_x + m(x)v^2\boldsymbol{\sigma}_z = -iv\hbar\partial_x\boldsymbol{\sigma}_x + m(x)v^2\boldsymbol{\sigma}_z \quad (1.12)$$

e

$$m(x) = \begin{cases} -m_1 & \text{se } x < 0 \\ +m_2 & \text{altrimenti} \end{cases}, \quad (1.13)$$

dove m_1 e $m_2 > 0$, e al posto della velocità della luce c consideriamo una generale velocità di Fermi v quando l'eq. di Dirac è applicata ai solidi.

L'equazione agli autovalori è

$$\begin{pmatrix} m(x)v^2 & -iv\hbar\partial_x \\ -iv\hbar\partial_x & -m(x)v^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1(x) \\ \varphi_2(x) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \varphi_1(x) \\ \varphi_2(x) \end{pmatrix}. \quad (1.14)$$

Possiamo risolvere l'equazione separatamente per $x < 0$ e $x > 0$. La soluzione della funzione d'onda dovrebbe essere continua a $x = 0$. Per avere una soluzione di stato legato che sia localizzata alla giunzione tra i due mezzi, richiederemo come condizione al contorno di Dirichlet che la funzione d'onda vada a 0 per $x \rightarrow \pm\infty$.

Per $x > 0$, impostiamo una funzione d'onda di prova del tipo

$$\begin{pmatrix} \varphi_1(x) \\ \varphi_2(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi_1^+ \\ \varphi_2^+ \end{pmatrix} e^{-\lambda_+ x}. \quad (1.15)$$

Quindi l'equazione secolare dà

$$\det \begin{pmatrix} m_2v^2 - E & iv\hbar\lambda_+ \\ iv\hbar\lambda_+ & -m_2v^2 - E \end{pmatrix} = 0. \quad (1.16)$$

Da cui $\lambda_+ = \pm\sqrt{m_2^2v^4 - E^2}/v\hbar$.

Le soluzioni di λ_+ possono essere reali o puramente immaginarie. Le soluzioni puramente immaginarie corrispondono a funzioni d'onda estese sull'intero spazio, che non ci interessano qui. Per $m_2^2v^4 > E^2$ le soluzioni sono reali, e la positiva è quella che rispetta la condizione al contorno per $x \rightarrow +\infty$.

Sostituendo la (1.15) in (1.14) otteniamo la relazione tra le due componenti della funzione d'onda

$$\varphi_1^+ = -\frac{iv\hbar\lambda_+}{m_2v^2 - E}\varphi_2^+. \quad (1.17)$$

Analogamente, per $x < 0$, abbiamo

$$\begin{pmatrix} \varphi_1(x) \\ \varphi_2(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi_1^- \\ \varphi_2^- \end{pmatrix} e^{+\lambda_- x}, \quad (1.18)$$

con $\lambda_- = \sqrt{m_1^2 v^4 - E^2} / v \hbar$, e

$$\varphi_1^- = -\frac{iv\hbar\lambda_-}{m_1 v^2 + E} \varphi_2^-. \quad (1.19)$$

A $x = 0$, la condizione di continuità richiede che

$$\begin{pmatrix} \varphi_1^+ \\ \varphi_2^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi_1^- \\ \varphi_2^- \end{pmatrix}, \quad (1.20)$$

da cui segue

$$\frac{-\sqrt{m_2^2 v^4 - E^2}}{m_2 v^2 - E} = \frac{\sqrt{m_1^2 v^4 - E^2}}{-m_1 v^2 - E}. \quad (1.21)$$

Con un paio di passaggi si arriva a $2Ev^2(m_1 + m_2) = 0$, per cui $E = 0$ o $m_1 = -m_2$. Essendo m_1 e m_2 entrambe positive, deve esistere una soluzione di energia zero, a cui corrisponde la funzione d'onda

$$\Psi_{1D}(x) = \sqrt{\frac{v}{\hbar} \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} e^{-\frac{|m(x)v x|}{\hbar}}. \quad (1.22)$$

La soluzione è localizzata intorno a $x = 0$ e decade esponenzialmente allontanandosi dalla giuntura tra le due regioni, come mostrato in figura 1.1.

La soluzione esiste anche quando $m_2 \rightarrow +\infty$; in questo caso $\Psi_{1D}(x) \rightarrow \mathbf{0}$ per $x > 0$. In tal senso, se consideriamo il vuoto come un sistema con massa positiva infinita, allora un sistema con massa negativa possiederà uno stato legato alla frontiera con il vuoto. Quindi, termini di massa di segno opposto in una hamiltoniana di Dirac possono spiegare l'esistenza di stati di bordo. Risulta dunque una prima analogia con il comportamento di un isolante topologico.

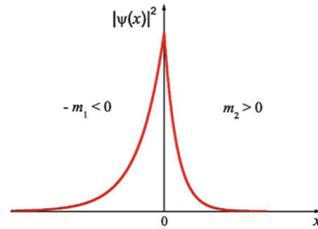


Figura 1.1: La densità di probabilità $|\Psi_{1D}(x)|^2$ di (1.22) in funzione di x

1.2.2 Caso bidimensionale

In due dimensioni, consideriamo un sistema con un'interfaccia parallela all'asse \hat{y} , con $m(x)$ che ha la stessa espressione (1.13) del caso 1D. Il sistema è invariante per traslazioni lungo la direzione \hat{y} , quindi $p_y = \hbar k_y$ è un buon numero quantico. L'equazione di Dirac 4×4 è

$$\mathbf{H}_{2D} = vp_x \boldsymbol{\alpha}_x + vp_y \boldsymbol{\alpha}_y + m(x)v^2 \boldsymbol{\beta}, \quad (1.23)$$

la quale può essere ridotta in due set indipendenti di equazioni 2×2

$$\mathbf{h}_{\pm} = vp_x \boldsymbol{\sigma}_x \pm vp_y \boldsymbol{\sigma}_y + m(x)v^2 \boldsymbol{\sigma}_z. \quad (1.24)$$

In questo caso abbiamo una soluzione di funzione d'onda localizzata intorno all'interfaccia, della forma

$$\boldsymbol{\psi}_{2D}(x, k_y) = \sqrt{\frac{v}{\hbar} \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} e^{-\frac{|m(x)v x|}{\hbar}} e^{ik_y y}. \quad (1.25)$$

Per verificare questa soluzione, riscriviamo la precedente hamiltoniana \mathbf{h}_{\pm} dividendola in due parti,

$$\mathbf{h}_{\pm} = \underbrace{vp_x \boldsymbol{\sigma}_x + m(x)v^2 \boldsymbol{\sigma}_z}_{\mathbf{H}_{1D}} \pm vp_y \boldsymbol{\sigma}_y. \quad (1.26)$$

Dalla soluzione 1D si ha:

$$(vp_x \boldsymbol{\sigma}_x + m(x)v^2 \boldsymbol{\sigma}_z) \boldsymbol{\psi}_{2D} = \mathbf{0} \quad (1.27)$$

e

$$\pm vp_y \boldsymbol{\sigma}_y \boldsymbol{\psi}_{2D} = \pm vp_y \boldsymbol{\psi}_{2D}. \quad (1.28)$$

In termini di spinori a 4 componenti, soluzioni della (1.23), si hanno

$$\boldsymbol{\Psi}_{2D}^+(x, k_y) = \sqrt{\frac{v}{\hbar} \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}} \begin{pmatrix} i \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{-\frac{|m(x)v x|}{\hbar}} e^{ik_y y} \quad (1.29)$$

e

$$\boldsymbol{\Psi}_{2D}^-(x, k_y) = \sqrt{\frac{v}{\hbar} \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}} \begin{pmatrix} 0 \\ i \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-\frac{|m(x)v x|}{\hbar}} e^{ik_y y}. \quad (1.30)$$

La relazione di dispersione per i due stati è

$$E_{edge}^{\pm}(k_y) = \pm v \hbar k_y, \quad (1.31)$$

da cui si hanno le velocità effettive con cui si propagano gli elettroni al bordo

$$v_{edge}^{\pm} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_{edge}^{\pm}}{\partial k_y} = \pm v. \quad (1.32)$$

Essendo $vp_y \alpha_y \Psi_{2D}^{\pm} = \pm vp_y \Psi_{2D}^{\pm}$, ciascuno stato trasporta una corrente lungo l'interfaccia, ma gli elettroni con spin diversi si muovono in direzioni opposte. La densità di corrente decade in modo esponenziale allontanandosi dall'interfaccia. Poiché il sistema ha la simmetria di inversione temporale¹, i due stati sono l'omologo *time-reversed* l'uno dell'altro (doppietto di Kramers²), costituendo all'interfaccia una coppia di stati di bordo elicoidali (spin e direzione del moto sono legati tra loro).

¹Si noti che le hamiltoniane 2×2 in (1.24) rompono la simmetria per inversione temporale, mentre questa è preservata dall'equazione originale di Dirac 4×4 .

²Per l'operatore di inversione temporale Θ , che trasforma $t \rightarrow -t$, vale $\Theta^2 = -\mathbf{I}$ per sistemi a spin semi-intero. Ciò porta alla formulazione del teorema di Kramers: in un sistema con un numero dispari di particelle con spin semi-intero ogni livello di energia è almeno doppiamente degenere, ossia devono esistere almeno due stati per ogni livello di energia del sistema.

1.3 La correzione quadratica all'equazione di Dirac

Abbiamo visto finora che, dall'equazione di Dirac, c'è una soluzione di stati legati all'interfaccia tra due mezzi con masse o energie positive e negative, con analogie al comportamento di un isolante topologico.

Se assumiamo che il vuoto sia un isolante con massa (= energia di *gap*) positiva infinita, un sistema con massa negativa avrà degli stati legati alla frontiera. Tuttavia la simmetria tra masse positive e negative nell'equazione di Dirac, non ci permette di distinguere topologicamente i due sistemi, non possiamo determinare quale sia topologicamente banale o non banale.

Allora per analizzare una possibile descrizione di un isolante topologico, introduciamo una correzione quadratica in \mathbf{p} al termine di massa della (1.1),

$$\mathbf{H} = v\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\alpha} + (mv^2 - B\mathbf{p}^2)\boldsymbol{\beta}, \quad (1.33)$$

dove B^{-1} ha le dimensioni di una massa. Il termine quadratico rompe la simmetria tra masse di segno opposto e rende questa equazione topologicamente distinta dall'equazione originale di Dirac.

Per mostrarlo, vediamo la distribuzione di spin allo stato fondamentale nello spazio dei momenti, in figura 1.2. A $p = 0$, l'orientazione dello spin è determinato da $mv^2\boldsymbol{\beta}$ e quindi dal segno di m , mentre per grandi valori di p , è determinato prevalentemente da $-B\mathbf{p}^2\boldsymbol{\beta}$ e quindi dal segno di B . Se il parametro adimensionale $mB > 0$, al crescere di p lungo una direzione, ad esempio \hat{x} , lo spin ruoterà dalla direzione \hat{z} di \mathbf{p} a quella \hat{x} al valore $p_c^2 = mv^2/B$, e per valori sempre maggiori di p assumerà direzione lungo \hat{z} opposta a quella iniziale. Per $mB < 0$ invece, a $p = +\infty$ lo spin sarà parallelo alla direzione che ha per $p = 0$.

La direzione dello spin a $p = +\infty$, parallela o antiparallela rispetto a quella assunta in $p = 0$, determina una distinzione topologica in base al segno di mB .

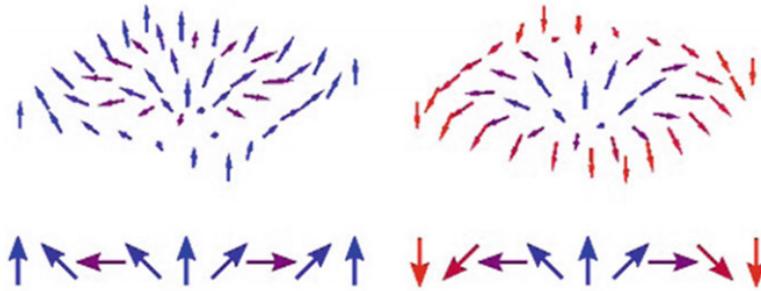


Figura 1.2: L'orientazione dello spin nello spazio dei momenti. A sinistra il caso $mB < 0$, con spin paralleli a $p = 0$ e $p = +\infty$. A destra, il caso $mB > 0$, con spin antiparalleli. In basso, l'orientazione dello spin lungo l'asse \hat{p}_x .

1.4 Stati legati per l'equazione di Dirac modificata

1.4.1 Caso unidimensionale

Analizziamo inizialmente il caso 1D. L'hamiltoniana è

$$\mathbf{H}_{1D}(x) = vp_x\boldsymbol{\sigma}_x + (mv^2 - Bp_x^2)\boldsymbol{\sigma}_z. \quad (1.34)$$

Per uno spazio unidimensionale $x \geq 0$, consideriamo una condizione al contorno $\boldsymbol{\psi}_{1D}(x=0) = \mathbf{0}$ e, per avere soluzioni di stato legato localizzate alla frontiera, richiediamo che $\boldsymbol{\psi}_{1D}(x=+\infty) = \mathbf{0}$.

Poiché cerchiamo soluzioni di energia zero, abbiamo

$$[vp_x\boldsymbol{\sigma}_x + (mv^2 - Bp_x^2)\boldsymbol{\sigma}_z]\boldsymbol{\psi}_{1D}(x) = \mathbf{0}. \quad (1.35)$$

Moltiplichiamo a sinistra per $\boldsymbol{\sigma}_x$, ottenendo

$$\partial_x\boldsymbol{\psi}_{1D}(x) = -\frac{1}{v\hbar}(mv^2 + B\hbar^2\partial_x^2)\boldsymbol{\sigma}_y\boldsymbol{\psi}_{1D}(x). \quad (1.36)$$

Consideriamo $\boldsymbol{\psi}_{1D}(x) = \varphi(x)\boldsymbol{\chi}_\eta$, con $\boldsymbol{\sigma}_y\boldsymbol{\chi}_\eta = \eta\boldsymbol{\chi}_\eta$ e $\eta = \pm 1$. Si ha

$$\partial_x\varphi(x) = -\frac{\eta}{v\hbar}(mv^2 + B\hbar^2\partial_x^2)\varphi(x). \quad (1.37)$$

Usando la funzione di prova $\varphi(x) \propto e^{-\lambda x}$, si ottiene

$$B\hbar^2\lambda^2 - \eta v\hbar\lambda + mv^2 = 0. \quad (1.38)$$

Richiediamo che siano soddisfatte le condizioni,

$$\varphi(x=0) = \varphi(x=+\infty) = 0, \quad (1.39)$$

per avere una soluzione di stato di bordo; otteniamo che le due radici debbano essere positive

$$\lambda_{\pm} = \frac{v}{2|B|\hbar}(1 \pm \sqrt{1 - 4mB}), \quad (1.40)$$

assumendo $\eta = \text{sgn}(B)$ (consideriamo, senza perdita di generalità, che v sia sempre positiva).

Poiché $\lambda_+\lambda_- = mv^2/B\hbar^2$, si ha che nella condizione $mB > 0$ esiste una soluzione

$$\boldsymbol{\psi}_{1D} = \frac{C}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \text{sgn}(B) \\ i \end{pmatrix} (e^{-\lambda_+x} - e^{-\lambda_-x}), \quad (1.41)$$

con C costante di normalizzazione. L'andamento della densità di probabilità è graficato in figura 1.3.

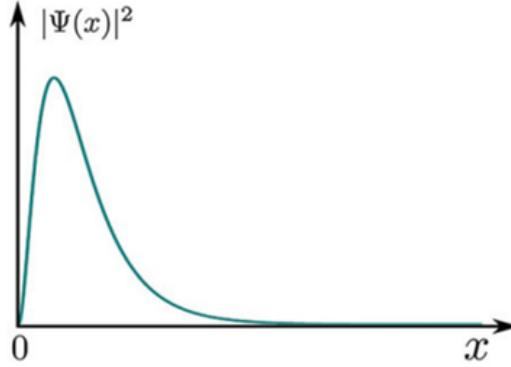


Figura 1.3: La densità di probabilità $|\psi_{1D}(x)|^2$ di (1.41) in funzione di x .

Nella forma a 4 componenti alla (1.33), si hanno due soluzioni degeneri

$$\Psi_1 = \frac{C}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \text{sgn}(B) \\ 0 \\ 0 \\ i \end{pmatrix} (e^{-\lambda+x} - e^{-\lambda-x}) \quad (1.42)$$

e

$$\Psi_2 = \frac{C}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ \text{sgn}(B) \\ i \\ 0 \end{pmatrix} (e^{-\lambda+x} - e^{-\lambda-x}). \quad (1.43)$$

A partire da queste funzioni d'onda, si trovano le soluzioni per casi a dimensione maggiore.

1.4.2 Caso bidimensionale: stati di bordo elicoidali

In due dimensioni, consideriamo un sistema con un'interfaccia parallela all'asse \hat{y} ; $p_y = \hbar k_y$ è un buon numero quantico. L'equazione di Dirac 4×4 è

$$\mathbf{H}_{2D} = vp_x \alpha_x + vp_y \alpha_y + (mv^2 - B\mathbf{p}^2)\beta. \quad (1.44)$$

Possiamo riscrivere questa equazione come

$$\mathbf{H}_{2D} = [vp_x \alpha_x + (mv^2 - Bp_x^2)\beta] + [vp_y \alpha_y - Bp_y^2\beta] = \mathbf{H}_x + \mathbf{H}_y. \quad (1.45)$$

Per $k_y = 0$, l'equazione 2D ha la stessa forma dell'equazione unidimensionale. Possiamo quindi considerare la parte dipendente da y come una perturbazione dell'hamiltoniana \mathbf{H}_x e usare le soluzioni 1D in (1.42) e (1.43) come base per le soluzioni 2D. Diagonalizziamo quindi \mathbf{H}_y nella base $\{\Psi_1, \Psi_2\}$

$$\mathbf{H}_{eff} = (\langle \Psi_1 |, \langle \Psi_2 |) \mathbf{H}_y \begin{pmatrix} |\Psi_1\rangle \\ |\Psi_2\rangle \end{pmatrix} = vp_y \text{sgn}(B) \sigma_z. \quad (1.46)$$

La relazione di dispersione per i due stati è

$$E_{edge}^{\pm}(p_y) = \pm v p_y \operatorname{sgn}(B), \quad (1.47)$$

da cui si hanno le velocità con cui si propagano gli elettroni al bordo, positiva e negativa nei loro due rispettivi stati.

Le soluzioni approssimate saranno nella forma

$$\Phi_{1,2}(x, k_y) \approx \Psi_{1,2} e^{ik_y y}. \quad (1.48)$$

Essendo le (1.48) autostati di α_y riferiti agli autovalori ± 1 , la direzione di propagazione degli elettroni dipende dal loro spin, up o down. Formano quindi una coppia di Kramers e determinano un paio di stati di bordo elicoidali.

La dipendenza dal segno di B nel modello efficace riflette il fatto che questi stati di bordo scompaiono se $B = 0$.

Riportiamo per completezza le soluzioni in forma esatta

$$\Psi_1 = \frac{C}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \operatorname{sgn}(B) \\ 0 \\ 0 \\ i \end{pmatrix} (e^{-\lambda_+ x} - e^{-\lambda_- x}) e^{ik_y y} \quad (1.49)$$

e

$$\Psi_2 = \frac{C}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ \operatorname{sgn}(B) \\ i \\ 0 \end{pmatrix} (e^{-\lambda_+ x} - e^{-\lambda_- x}) e^{ik_y y}, \quad (1.50)$$

con λ_{\pm} ora dipendente da p_y

$$\lambda_{\pm} = \frac{v}{2|B|\hbar} \left(1 \pm \sqrt{1 - 4mB + 4B^2 p_y^2 / v^2} \right). \quad (1.51)$$

Le soluzioni di stati di bordo esistono quindi a patto che $mB > 0$. Si vedrà che a questa stessa condizione corrisponderà la condizione di topologicamente non banale.

1.5 Invariante topologico \mathbb{Z}_2 e diagramma di fase dell'equazione di Dirac modificata

Esistono due classi di invarianti topologici per le fasi topologiche della materia. Il primo è caratterizzato dagli elementi del gruppo \mathbb{Z} , che consiste di tutti i numeri interi. Ad esempio, l'effetto Hall quantistico intero è caratterizzato dall'intero ν , detto primo numero di Chern, che compare nella conduttanza di Hall $\sigma_H = \nu \frac{e^2}{h}$. La seconda classe è caratterizzata dagli elementi del gruppo \mathbb{Z}_2 , che consiste in 0 e 1. In un isolante topologico 2D con simmetria di inversione temporale, 0 e 1 rappresentano l'esistenza di coppie pari e dispari di stati di bordo elicoidali.

L'equazione di Dirac è invariante per inversione temporale, e può essere classificata secondo la classificazione topologica \mathbb{Z}_2 , seguendo gli argomenti di Kane e Mele.

Partiamo dalle soluzioni generali di funzioni d'onda per un sistema infinito o con condizioni al contorno periodiche, espresse come

$$\Psi_\nu = \mathbf{u}_\nu(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - E_{p,\nu}t)/\hbar}. \quad (1.52)$$

Le relazioni di dispersione delle quattro bande di energia sono

$$E_{p,\nu(=1,2)} = -E_{p,\nu(=3,4)} = \sqrt{v^2 p^2 + (mv^2 - Bp^2)^2}. \quad (1.53)$$

Gli spinori a 4 componenti $\mathbf{u}_\nu(\mathbf{p})$ possono essere espressi come

$$\mathbf{u}_\nu(\mathbf{p}) = \mathbf{S} \mathbf{u}_\nu(\mathbf{p} = \mathbf{0}), \quad (1.54)$$

con

$$\mathbf{S} = \sqrt{\frac{\epsilon_p}{2E_{p,1}}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -\frac{p_z v}{\epsilon_p} & -\frac{p_- v}{\epsilon_p} \\ 0 & 1 & -\frac{p_+ v}{\epsilon_p} & \frac{p_z v}{\epsilon_p} \\ \frac{p_z v}{\epsilon_p} & \frac{p_- v}{\epsilon_p} & 1 & 0 \\ \frac{p_+ v}{\epsilon_p} & -\frac{p_z v}{\epsilon_p} & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (1.55)$$

dove $p_\pm = p_x \pm ip_y$, $\epsilon = E_{p,1} + (mv^2 - Bp^2)$, e $\mathbf{u}_\nu(\mathbf{0})$ è uno dei 4 autostati di β .

Nella rappresentazione (1.9) delle matrici di Dirac, l'operatore di inversione temporale è definito come $\Theta \equiv -i\alpha_x \alpha_z \mathcal{K}$, dove \mathcal{K} è l'operatore di coniugazione complessa che dà il coniugato complesso di ogni coefficiente che moltiplica una funzione d'onda. Si ha quindi

$$\Theta \mathbf{H}(\mathbf{p}) \Theta^{-1} = \mathbf{H}(-\mathbf{p}), \quad (1.56)$$

(p è un buon numero quantico del momento). Inoltre abbiamo le seguenti relazioni

$$\Theta \mathbf{u}_1(\mathbf{p}) = -i\mathbf{u}_2(-\mathbf{p}) \quad (1.57)$$

e

$$\Theta \mathbf{u}_2(\mathbf{p}) = +i\mathbf{u}_1(-\mathbf{p}), \quad (1.58)$$

che soddisfano la proprietà $\Theta^2 = -I$.

Analogamente,

$$\Theta \mathbf{u}_3(\mathbf{p}) = -i\mathbf{u}_4(-\mathbf{p}) \quad (1.59)$$

e

$$\Theta \mathbf{u}_4(\mathbf{p}) = +i\mathbf{u}_3(-\mathbf{p}). \quad (1.60)$$

Quindi, le soluzioni $\{\mathbf{u}_1(\mathbf{p}), \mathbf{u}_2(-\mathbf{p})\}$ e $\{\mathbf{u}_3(\mathbf{p}), \mathbf{u}_4(-\mathbf{p})\}$ sono due coppie degeneri di Kramers, di energia positiva e negativa, rispettivamente.

La matrice di sovrapposizione $\{\langle \mathbf{u}_\mu(\mathbf{p}) | \Theta | \mathbf{u}_\nu(\mathbf{p}) \rangle\}$ ha la forma

$$\begin{pmatrix} 0 & i\frac{mv^2 - Bp^2}{E_{p,1}} & -i\frac{p-v}{E_{p,1}} & i\frac{p_z v}{E_{p,1}} \\ -i\frac{mv^2 - Bp^2}{E_{p,1}} & 0 & i\frac{p_z v}{E_{p,1}} & i\frac{p+v}{E_{p,1}} \\ i\frac{p-v}{E_{p,1}} & -i\frac{p_z v}{E_{p,1}} & 0 & i\frac{mv^2 - Bp^2}{E_{p,1}} \\ -i\frac{p_z v}{E_{p,1}} & -i\frac{p+v}{E_{p,1}} & -i\frac{mv^2 - Bp^2}{E_{p,1}} & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.61)$$

ed è antisimmetrica, $\langle \mathbf{u}_\mu(\mathbf{p}) | \Theta | \mathbf{u}_\nu(\mathbf{p}) \rangle = -\langle \mathbf{u}_\nu(\mathbf{p}) | \Theta | \mathbf{u}_\mu(\mathbf{p}) \rangle$. Per le due bande di energia negativa $\mathbf{u}_3(\mathbf{p})$ e $\mathbf{u}_4(\mathbf{p})$, che sono completamente occupate per un isolante, la sottomatrice di sovrapposizione può essere espressa in termini di un singolo numero come $\epsilon_{\mu\nu} P(\mathbf{p})$, dove

$$P(\mathbf{p}) = i \frac{mv^2 - Bp^2}{\sqrt{(mv^2 - Bp^2)^2 + v^2 p^2}}, \quad (1.62)$$

è lo Pfaffiano³ della matrice 2×2 .

Seguendo Kane e Mele, il numero, pari o dispari, di coppie di zeri in $P(\mathbf{p})$ definisce l'invariante topologico \mathbb{Z}_2 e quindi, rispettivamente, una fase

³In matematica, una matrice antisimmetrica è una matrice quadrata \mathbf{A} la cui trasposta è anche la sua opposta, $\mathbf{A} = -\mathbf{A}^T$. Il determinante di una matrice antisimmetrica può sempre essere scritto come il quadrato di un polinomio costruito a partire dagli elementi della matrice; questo polinomio è detto lo Pfaffiano della matrice, $\det(\mathbf{A}) = Pf(\mathbf{A})^2$. Lo Pfaffiano è nullo per le matrici antisimmetriche di ordine dispari, mentre per le matrici di ordine pari, cioè del tipo $2n \times 2n$, è un polinomio di grado n .

topologicamente banale e non banale. Vogliamo sottolineare come i due casi siano determinati dal segno del parametro adimensionale mB .

Per $mB \leq 0$, lo Pfaffiano $P(\mathbf{p})$ è sempre diverso da zero, si conclude subito che l'hamiltoniana modificata di Dirac, inclusa l'hamiltoniana convenzionale ($B = 0$), è topologicamente banale.

Per $mB > 0$ il caso è differente. In questo modello continuo, la zona di Brillouin diventa infinita. A $p = 0$ e $p = +\infty$, $P(0) = i \operatorname{sgn}(m)$ e $P(+\infty) = -i \operatorname{sgn}(B)$. In questo caso $P(\mathbf{p}) = 0$ a $p^2 = mv^2/B$. $\mathbf{p} = \mathbf{0}$ è sempre uno dei *time reversal invariant momenta*⁴. Come conseguenza di un modello isotropo nello spazio dei momenti, possiamo pensare che tutti i punti di $p = +\infty$ si riducano in un punto se consideriamo il modello continuo come un limite del modello reticolare, tendendo il passo reticolare $a \rightarrow 0$ e quindi il vettore del reticolo reciproco $G = 2\pi/a \rightarrow +\infty$. In questo senso, come limite di un reticolo quadrato gli altri tre *time reversal invariant momenta* hanno $P(0, G/2) = P(G/2, 0) = P(G/2, G/2) = P(+\infty)$, che ha il segno opposto a $P(0)$ se $mB > 0$. Si conclude che l'equazione modificata di Dirac è topologicamente non banale solo se $mB > 0$.

In figura 1.4 è riportato il diagramma di fase degli stati topologici come funzione dei due parametri m e B del modello.

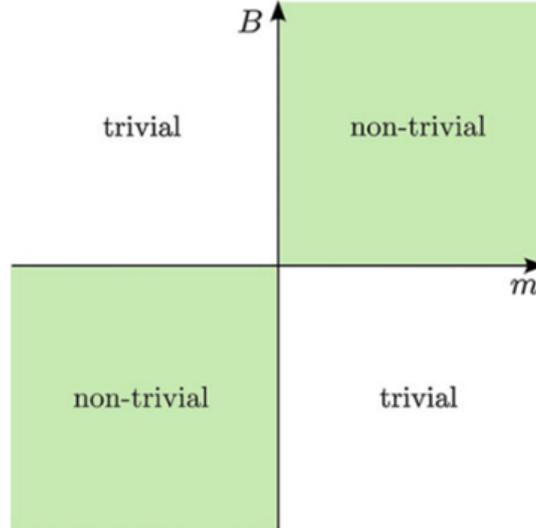


Figura 1.4: Il diagramma di fase degli stati topologici dell'equazione di Dirac modificata

⁴I punti nello spazio dei momenti che soddisfano $-\Gamma_i = \Gamma_i + n_i \mathbf{G}$, dove \mathbf{G} è un vettore del reticolo reciproco e $n_i = 0, 1$. In questi punti $\Gamma_i = n_i \mathbf{G}/2$, si ha $\mathbf{H}(\Gamma_i) = \Theta \mathbf{H}(\Gamma_i) \Theta^{-1}$. Per un reticolo quadrato, vi sono 4 *time reversal invariant momenta* nella prima zona di Brillouin.

Capitolo 2

Modello per il quantum spin Hall effect

Il modello di Kane e Mele per l'effetto spin-Hall quantistico prevede termini di accoppiamento spin-orbita in un reticolo di grafene. Gli stati di conduzione sulla superficie sono protetti dalla simmetria temporale.

2.1 Il modello di Kane e Mele

Gli stati dell'effetto Hall quantistico appartengono a una classe topologica che rompe esplicitamente la simmetria per inversione temporale, a causa della presenza di un campo magnetico. Con l'obiettivo di costruire stati topologici invarianti per *time reversal*, si sono cercati stati della materia in cui qualcos'altro potesse sostituire il ruolo del campo magnetico.

Nel 2005 Kane e Mele predissero un nuovo fenomeno, il *quantum spin Hall effect*, a partire da un modello di grafene che prevede elettroni a spin $\frac{1}{2}$. L'accoppiamento spin-orbita sostituisce l'azione del campo magnetico, ma genera stati topologici che rispettano la simmetria temporale.

L'effetto QSH è una versione con spin dell'effetto Hall quantistico. Un sistema QSH possiede un paio di stati di bordo elicoidali; il risultato è l'assenza di una conduttanza di Hall elettrica, ma la presenza di una conduttanza spin-Hall. Infatti, gli elettroni con spin up fluiscono in una direzione, quelli con spin down vanno nella direzione opposta, $I_{\uparrow} = -I_{\downarrow}$; la corrente elettrica netta è nulla, $I_c \equiv I_{\uparrow} + I_{\downarrow} = 0$, ed infatti questa romperebbe la simmetria temporale. Al contrario, una pura corrente di spin circola alla frontiera del sistema, $I_s \equiv \frac{\hbar}{2e}(I_{\uparrow} - I_{\downarrow})$; la corrente di spin non rompe la simmetria, date le trasformazioni $\mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}$ del momento e $\sigma \rightarrow -\sigma$ dello spin per inversione temporale.

L'hamiltoniana di *tight binding* introdotta da Kane e Mele è

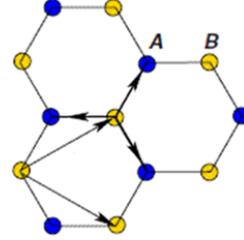
$$\mathbf{H} = t \sum_{\langle i,j \rangle} c_i^\dagger c_j + i\lambda_{SO} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \nu_{ij} c_i^\dagger \mathbf{s}_z c_j + i\lambda_R \sum_{\langle i,j \rangle} c_i^\dagger (\mathbf{s} \times \mathbf{d}_{ij}) c_j + \lambda_v \sum_i \xi_i c_i^\dagger c_i. \quad (2.1)$$

$\langle i, j \rangle$ indica le coppie di primi vicini, $\langle\langle i, j \rangle\rangle$ le coppie di secondi vicini.

Il primo termine è il termine di *hopping* per primi vicini sul reticolo a nido d'ape del grafene; c_i^\dagger e c_i sono gli operatori di creazione e distruzione di un elettrone al sito i con spin up o down (l'indice di spin è soppresso $c_i^\dagger = (c_{i,\uparrow}^\dagger, c_{i,\downarrow}^\dagger)$).

Il secondo termine è di interazione spin-orbita con simmetria speculare, quindi con i secondi vicini; qui $\nu_{i,j} = \frac{2}{\sqrt{3}}(\mathbf{d}_i \times \mathbf{d}_j)_z = \pm 1$, dove \mathbf{d}_1 e \mathbf{d}_2 sono vettori unitari lungo i due legami che l'elettrone attraversa andando dal sito j a i . \mathbf{s}_z è una matrice di Pauli che descrive lo spin dell'elettrone.

Il terzo termine è il termine di Rashba, di interazione spin-orbita con i primi vicini; esso viola esplicitamente la simmetria speculare $z \rightarrow -z$ e insorgerà per un campo elettrico perpendicolare o per interazione con un substrato. L'inclusione del termine Rashba rende il sistema più complicato in quanto S_z non viene più conservato e gli elettroni con spin up e down sono accoppiati insieme.



Il quarto termine è un potenziale sfalsato di sottoreticolo con $\xi_i = \pm 1$, che descrive la transizione tra la fase QSH e l'isolante semplice. Questo termine viola la simmetria per duplici rotazioni nel piano.

Una hamiltoniana a quattro bande può essere sempre espressa in termini delle matrici Gamma di Dirac:

$$\mathbf{H} = \sum_k c_k^\dagger \mathcal{H}(\mathbf{k}) c_k, \quad (2.2)$$

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \sum_{a=1}^5 d_a(\mathbf{k}) \Gamma^a + \sum_{a<b=1}^5 d_{ab}(\mathbf{k}) \Gamma^{ab}. \quad (2.3)$$

Le 5 matrici di Dirac sono

$$\Gamma^{(1,2,3,4,5)} = (\sigma_x \otimes \sigma_0, \sigma_z \otimes \sigma_0, \sigma_y \otimes s_x, \sigma_y \otimes s_y, \sigma_y \otimes s_z) \quad (2.4)$$

e i loro 10 commutatori

$$\Gamma^{ab} = \frac{1}{2i} [\Gamma^a, \Gamma^b], \quad (2.5)$$

dove le matrici di Pauli σ_i e s_i rappresentano gli indici di sottoreticolo e di spin. In questa rappresentazione l'operatore di inversione temporale è $\Theta = i(\sigma_0 \otimes s_y) \mathcal{K}$. Le 5 matrici di Dirac sono pari sotto *time reversal*, mentre i 10 commutatori sono dispari,

$$\Theta \Gamma^a \Theta^{-1} = \Gamma^a, \quad \Theta \Gamma^{ab} \Theta^{-1} = -\Gamma^{ab}. \quad (2.6)$$

2.1. Il modello di Kane e Mele

Affinché l'hamiltoniana sia invariante per simmetria temporale, i coefficienti devono soddisfare le relazioni

$$d_a(-\mathbf{k}) = d_a(\mathbf{k}), \quad d_{ab}(-\mathbf{k}) = -d_{ab}(\mathbf{k}). \quad (2.7)$$

I coefficienti $d(\mathbf{k})$ diversi da zero sono riportati nella seguente figura 2.1.

d_1	$t(1 + 2 \cos x \cos y)$	d_{12}	$-2t \cos x \sin y$
d_2	λ_v	d_{15}	$\lambda_{SO}(2 \sin 2x - 4 \sin x \cos y)$
d_3	$\lambda_R(1 - \cos x \cos y)$	d_{23}	$-\lambda_R \cos x \sin y$
d_4	$-\sqrt{3}\lambda_R \sin x \sin y$	d_{24}	$\sqrt{3}\lambda_R \sin x \cos y$

Figura 2.1: I coefficienti in (2.3) con $x = k_x a/2$ e $y = \sqrt{3}k_y a/2$.

Per $\lambda_R = 0$ vi è un *gap* di energia di grandezza $|6\sqrt{3}\lambda_{SO} - 2\lambda_v|$. Per $\lambda_v > 3\sqrt{3}\lambda_{SO}$ il *gap* è dominato da λ_v e il sistema è un isolante. Per $\lambda_v < 3\sqrt{3}\lambda_{SO}$ vi è una fase QSH.

Anche se il termine di Rashba viola la conservazione di S_z , per $\lambda_R < 2\sqrt{3}\lambda_{SO}$ vi è una regione finita del diagramma delle fasi in figura 2.2 che è adiabaticamente connessa alla fase QSH a $\lambda_R = 0$.

Per una striscia campione, adottiamo condizioni al contorno periodiche nella direzione \hat{x} , tale che k_x è un buon numero quantico. L'esatta diagonalizzazione dà la relazione di dispersione dell'energia del sistema in funzione di $k_x a$. La figura 2.2 mostra le bande di energia risolte numericamente; si trova che vi sono due fasi distinte. Entrambe le fasi presentano un *gap* di energia nel *bulk* e hanno stati di bordo. Al passaggio tra le due fasi, il *gap* energetico si chiude. La differenza è che nella fase QSH abbiamo un paio di stati di *edge* che connettono per ogni bordo la banda di valenza con quella di conduzione, rappresentando una fase della materia topologicamente non banale.

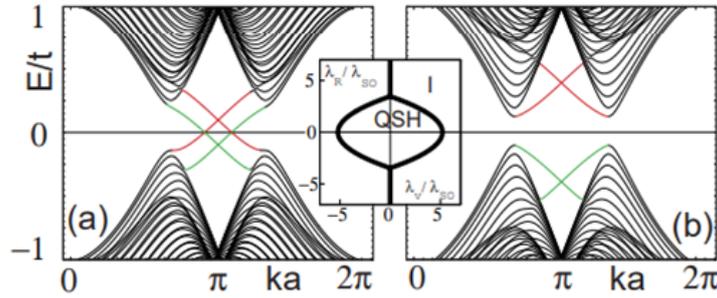


Figura 2.2: Le bande di energia per una striscia unidimensionale: in (a) la fase QSH con $\lambda_v = 0, 1t$; in (b) la fase isolante con $\lambda_v = 0, 4t$. In entrambi i casi $\lambda_{SO} = 0, 06t$ e $\lambda_R = 0, 05t$. L'inserito mostra il diagramma di fase come funzione di λ_v e λ_R per $0 < \lambda_{SO} \ll t$.

2.2 La stabilità degli stati di bordo

Se si assume un'impurità, data da un potenziale V invariante per inversione temporale, non vi è *backscattering* tra i due stati di bordo elicoidali. L'operatore di *time-reversal* $\Theta^2 = -\mathbf{I}$, quindi $|\mathbf{u}_{-\mathbf{k},\downarrow}\rangle = \Theta |\mathbf{u}_{\mathbf{k},\uparrow}\rangle$ e $|\mathbf{u}_{\mathbf{k},\uparrow}\rangle = -\Theta |\mathbf{u}_{-\mathbf{k},\downarrow}\rangle$. L'operatore Θ è antiunitario e ha la proprietà

$$\langle \Theta\alpha | V | \Theta\beta \rangle = \langle \beta | V | \alpha \rangle. \quad (2.8)$$

Usando questa relazione, si conclude che

$$\langle \mathbf{u}_{\mathbf{k},\uparrow} | V | \mathbf{u}_{-\mathbf{k},\downarrow} \rangle = 0. \quad (2.9)$$

Li e Shi hanno proposto un argomento generale per la robustezza degli stato di bordo elicoidali. Un isolante QSH bidimensionale è un isolante nel *bulk* e presenta stati *gapless* ai bordi, con un numero dispari di coppie di Kramers per ciascun canale di conduzione. È questa la differenza sostanziale con un isolante ordinario. Infatti anche un isolante ordinario, per certi potenziali di bordo, potrebbe mostrare stati conduttivi alla frontiera, ma ci sarà necessariamente un numero pari di coppie di Kramers per ogni energia; ciò consente un *backscattering* elastico, tale che questi stati di *edge* saranno in genere localizzati da un disordine debole.

In generale, la trasmissione lungo un conduttore può essere caratterizzata da una matrice \mathbf{S} $2N \times 2N$, che mette in relazione l'ampiezza dell'onda in entrata (ψ_{in}) e in uscita (ψ_{out}):

$$\psi_{out} = \mathbf{S}\psi_{in}, \quad (2.10)$$

dove

$$\psi_{in} = (a_1^+, a_2^+, \dots, a_N^+; b_1^-, b_2^-, \dots, b_N^-)^T \quad (2.11)$$

e

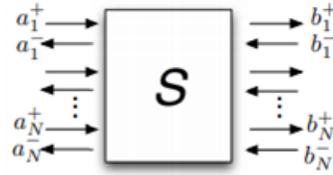
$$\psi_{out} = (a_1^-, a_2^-, \dots, a_N^-; b_1^+, b_2^+, \dots, b_N^+)^T. \quad (2.12)$$

a_i^+ (b_i^+) e a_i^- (b_i^-) indicano rispettivamente l'ampiezza delle onde verso destra e verso sinistra. a_i^\pm o b_i^\pm con lo stesso indice i sono correlati per simmetria temporale e formano una coppia di Kramers. N denota il numero totale di doppietti di Kramers ad ogni bordo, e può essere dispari per isolante QSH o pari per un isolante ordinario. In questa notazione, la simmetria temporale impone un vincolo alla matrice \mathbf{S} :

$$\mathbf{S}^T = -\mathbf{S}. \quad (2.13)$$

Inoltre, la conservazione della carica implica che la matrice \mathbf{S} debba essere unitaria, $\mathbf{S}^\dagger \mathbf{S} = \mathbf{I}$. Con questi vincoli, \mathbf{S} si può decomporre e scrivere come

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \mathbf{U}^T & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{V}^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r & t \\ -t & -r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{U} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{V} \end{pmatrix}, \quad (2.14)$$



dove \mathbf{U} e \mathbf{V} sono due matrici unitarie $N \times N$ mentre \mathbf{r} e \mathbf{t} rappresentano le matrici di riflessione e di trasmissione.

Per $N = 2n$ pari, \mathbf{r} è una matrice diagonale a blocchi

$$\mathbf{r} = \text{diag}(i\sqrt{1-T_1}\boldsymbol{\sigma}_y, i\sqrt{1-T_2}\boldsymbol{\sigma}_y, \dots, i\sqrt{1-T_n}\boldsymbol{\sigma}_y) \quad (2.15)$$

e

$$\mathbf{t} = \text{diag}(\sqrt{T_1}\boldsymbol{\sigma}_0, \sqrt{T_2}\boldsymbol{\sigma}_0, \dots, \sqrt{T_n}\boldsymbol{\sigma}_0). \quad (2.16)$$

Per $N = 2n + 1$ dispari, si hanno

$$\mathbf{r} = \text{diag}(i\sqrt{1-T_1}\boldsymbol{\sigma}_y, i\sqrt{1-T_2}\boldsymbol{\sigma}_y, \dots, 0) \quad (2.17)$$

e

$$\mathbf{t} = \text{diag}(\sqrt{T_1}\boldsymbol{\sigma}_0, \sqrt{T_2}\boldsymbol{\sigma}_0, \dots, 1). \quad (2.18)$$

T_i denota il coefficiente di trasmissione nell' i -esimo canale di conduzione. Si vede immediatamente che per N dispari c'è almeno un canale di conduzione che ha trasmissione perfetta $T_i = 1$, che non è influenzato negativamente dal disordine. Questa è la ragione alla base della robustezza degli stati di bordo elicoidali nell'effetto spin Hall quantistico. Secondo la classificazione \mathbb{Z}_2 per un sistema isolante invariante per *time reversal*, esiste sempre un numero dispari di coppie di Kramers negli stati conduttivi di bordo lungo ciascun bordo di un campione. Tuttavia, nella geometria di una striscia, ci sono due bordi e il numero totale di coppie di Kramers è comunque pari complessivamente. La conduttanza non è realmente quantizzata se vi sono interazioni che fanno accoppiare i canali ai due bordi.

Ci si può figurare il fenomeno con un'analogia dalla vita quotidiana. La maggior parte degli occhiali da vista e degli obiettivi delle fotocamere ha un rivestimento antiriflesso.

Come mostrato nella figura 2.3, la luce riflessa dalle superfici superiore e inferiore interferiscono tra loro in modo distruttivo, portando un riflesso netto nullo e quindi una trasmissione perfetta. Tuttavia, tale effetto non è robusto, poiché dipende dalla corrispondenza tra la lunghezza d'onda ottica e lo spessore del rivestimento.

Proprio come la riflessione di un fotone da una superficie, un elettrone può essere riflesso da un'impurità e diversi percorsi di riflessione interferiscono tra loro. Un elettrone in uno stato di bordo QSH può compiere un giro in senso orario o antiorario attorno ad un'impurità non magnetica, e durante quel giro lo spin ruota di un angolo di π o $-\pi$ per poi continuare in direzione opposta. Di conseguenza i due cammini, legati dalla simmetria temporale, differiscono per una rotazione completa di $\pi - (-\pi) = 2\pi$ dello spin dell'elettrone. La funzione d'onda di una particella di spin $\frac{1}{2}$ ottiene un segno negativo dopo una rotazione completa di 2π . Quindi i due percorsi di *backscattering* interferiscono sempre in modo distruttivo, il che

porta a una trasmissione perfetta. Se l'impurità è di tipo magnetica, la simmetria temporale viene rotta e i due cammini riflessi non interferiscono più distruttivamente.

In questo senso la robustezza dello stato di bordo QSH è protetta dalla simmetria temporale. Queste considerazioni valgono solo nel caso di una singola (o comunque in un numero dispari) coppia di stati di bordo del QSH. Se invece, ad esempio, sono presenti due canali di propagazione in avanti e due indietro per ogni bordo, con entrambi gli stati di spin, l'elettrone può essere riflesso senza cambiare il suo spin e quindi senza interferenza distruttiva, e ciò porta a effetti di dissipazione.

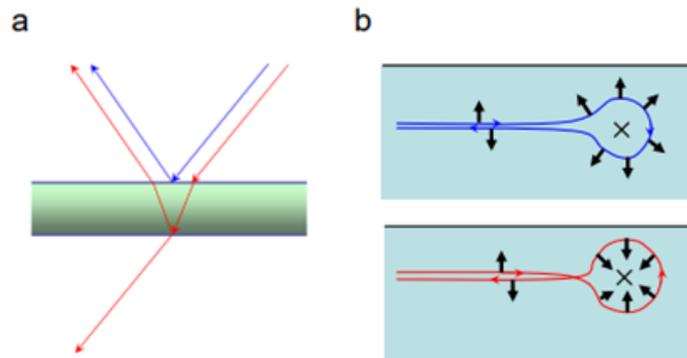


Figura 2.3: Il *backscattering* degli elettroni è soppresso in un modo simile a quello dei fotoni fuori dal rivestimento antiriflesso. Tratta da [5].

Capitolo 3

Predizione e realizzazione dello stato QSH

Il modello di Bernevig, Hughes e Zhang prevede l'esistenza del primo isolante topologico 2D in pozzi quantici di tellururo di mercurio interposti fra strati di tellururo di cadmio. Il modello è analogo all'equazione modificata di Dirac, e ne sono fornite le soluzioni esatte per stati di bordo. A partire da questi studi, nel 2007 sono stati realizzati ed osservati i primi pozzi quantici di HgTe/CdTe.

3.1 Modello per gli isolanti topologici 2D in quantum wells di HgTe/CdTe

La proposta iniziale di un isolante topologico nel grafene si è dimostrata sperimentalmente difficile da raggiungere: il *gap* aperto dall'interazione spin-orbita risulta essere estremamente piccolo, dell'ordine dei $\sim 10^{-3}$ meV.

Gli isolanti topologici sono stati osservati per la prima volta nelle *quantum wells* di HgTe/CdTe. Si realizza il pozzo quantico posizionando uno strato di HgTe dello spessore nell'ordine dei nanometri tra due strati di CdTe. Secondo il modello proposto da Bernevig, Hughes e Zhang, le *quantum wells* di HgTe/CdTe sono caratterizzati da una transizione di fase in funzione dello spessore d_{QW} della *quantum well*. In particolare, questo risulta essere un convenzionale isolante per $d_{QW} < d_c$, e un isolante topologico con una coppia di stati elicoidali al bordo per $d_{QW} > d_c$, dove d_c è uno spessore critico.

Il meccanismo che sta dietro a tutto ciò è quello dell'inversione delle bande, secondo cui l'usuale ordine delle bande di valenza e di conduzione è invertito dall'accoppiamento spin-orbita. Nei più comuni semiconduttori, la banda di conduzione è formata da elettroni in orbitali di tipo s , mentre la banda di valenza è formata da elettroni in orbitali di tipo p . In alcuni elementi particolarmente pesanti, quali appunto il mercurio, l'accoppiamento

spin-orbita è così forte che la banda di tipo p è spinta sotto la banda di tipo s e perciò le bande di valenza e di conduzione sono invertite.

Sia per il HgTe che per il CdTe, il *gap* energetico è minore in prossimità del punto Γ ($\mathbf{k} = \mathbf{0}$) della zona di Brillouin, come mostrato in figura 3.1. Sono presenti le bande di tipo s (Γ_6) e quelle di tipo p splittate dall'accoppiamento spin-orbita in una banda con $J = \frac{3}{2}$ (Γ_8), doppiamente degenere, e una con $J = \frac{1}{2}$ (Γ_7).

Il CdTe ha il tipico ordinamento delle bande che si riscontra nei comuni semiconduttori, con la banda di tipo s (Γ_6) a fungere da banda di conduzione e le bande di valenza di tipo p (Γ_8, Γ_7) che sono separate dalla banda di conduzione da un grande *gap* di energia.

Nel HgTe, a causa del forte accoppiamento spin-orbita presente nel mercurio che è molto pesante, le bande sono invertite: la banda Γ_8 , che solitamente rappresenta la banda di valenza, questa volta si trova sopra la banda Γ_6 . La banda Γ_8 cosiddetta *light-hole* ($m_J = \pm\frac{1}{2}$) diventa quindi la banda di conduzione mentre la banda Γ_8 *heavy-hole* ($m_J = \pm\frac{3}{2}$) diventa la prima banda di valenza. La banda di tipo s Γ_6 è spinta sotto e si trova tra Γ_8 *heavy-hole* e la Γ_7 .

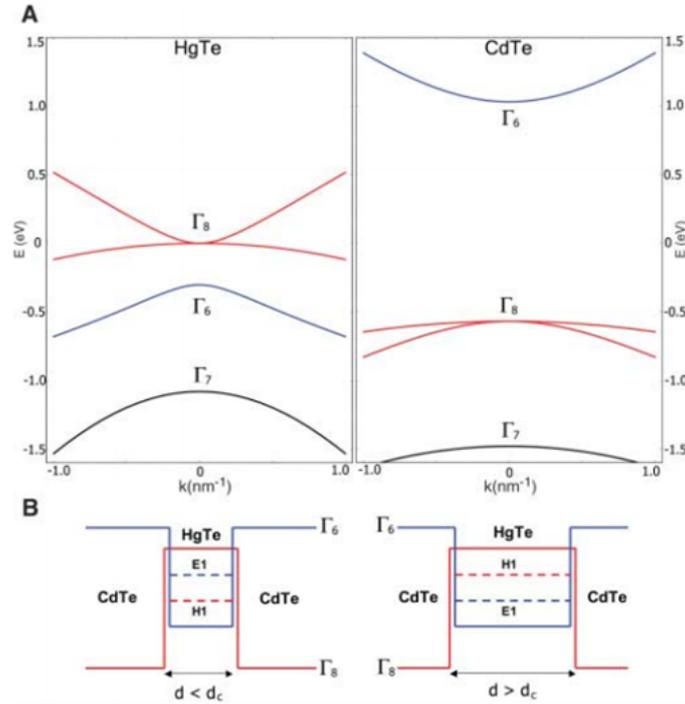


Figura 3.1: (A) La struttura a bande del HgTe (a sinistra) e del CdTe (a destra). (B) Rappresentazione schematica della geometria delle *quantum wells* con spessore inferiore e superiore allo spessore critico d_c .

Si trascurano gli effetti della banda Γ_7 , che si trova in un livello di energia più basso. Quindi, il modello è a sei bande, a partire dai seguenti sei stati atomici di base per cella unitaria combinati in uno spinore a sei componenti:

$$\Psi = \left(\left| \Gamma_6, \frac{1}{2} \right\rangle, \left| \Gamma_6, -\frac{1}{2} \right\rangle, \left| \Gamma_8, \frac{3}{2} \right\rangle, \left| \Gamma_8, \frac{1}{2} \right\rangle, \left| \Gamma_8, -\frac{1}{2} \right\rangle, \left| \Gamma_8, -\frac{3}{2} \right\rangle \right). \quad (3.1)$$

Nelle *quantum wells* sviluppati lungo \hat{z} , queste sei bande si combinano per formare tre sottobande di spin up e spin down, dette E_1 , H_1 e L_1 in letteratura. La sottobanda L_1 è separata dalle altre due e può essere trascurata, semplificando il modello in uno a quattro bande.

Al punto Γ con momento planare $k_{\parallel} \equiv \sqrt{k_x^2 + k_y^2} = 0$, m_J è un buon numero quantico. In questo punto, la sottobanda $|E_1, m_J\rangle$ è formata dalla combinazione lineare degli stati $|\Gamma_6, \pm\frac{1}{2}\rangle$ e $|\Gamma_8, \pm\frac{1}{2}\rangle$, mentre $|H_1, m_J\rangle$ è formata dagli stati $|\Gamma_8, \pm\frac{3}{2}\rangle$. Lontano dal punto Γ , E_1 e H_1 possono mescolarsi.

Poiché $|\Gamma_6, \pm\frac{1}{2}\rangle$ è pari sotto riflessione spaziale 2D, mentre $|\Gamma_8, \pm\frac{3}{2}\rangle$ è dispari, l'elemento di matrice che connette questi stati deve essere una funzione dispari del momento planare. Da queste considerazioni di simmetria, si deduce la forma generale dell'hamiltoniana efficace per gli stati E_1 e H_1 , espressa nella base $|E_1, \frac{1}{2}\rangle$, $|H_1, \frac{3}{2}\rangle$ e $|E_1, -\frac{1}{2}\rangle$, $|H_1, -\frac{3}{2}\rangle$ è

$$\mathcal{H}_{\text{BHZ}}(k_x, k_y) = \begin{pmatrix} \mathbf{h}(\mathbf{k}) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{h}^*(-\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (3.2)$$

con

$$\mathbf{h}(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k})\mathbf{I} + \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (3.3)$$

dove

$$\epsilon(\mathbf{k}) = C - Dk_{\parallel}^2, \quad (3.4)$$

$$\mathbf{d}(\mathbf{k}) = (Ak_x, Ak_y, M - Bk_{\parallel}^2), \quad (3.5)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = (\boldsymbol{\sigma}_x, \boldsymbol{\sigma}_y, \boldsymbol{\sigma}_z). \quad (3.6)$$

L'hamiltoniana è equivalente al modello 2D dell'equazione di Dirac modificata sviluppato a partire da (1.33), con l'aggiunta di un termine cinetico $\epsilon(\mathbf{k})$,

$$\mathbf{h}(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k})\mathbf{I} + \mathbf{h}_+ \quad (3.7)$$

e

$$\mathbf{h}^*(-\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k})\mathbf{I} + \mathbf{U}\mathbf{h}_-\mathbf{U}^{-1}, \quad (3.8)$$

con la matrice unitaria di trasformazione $\mathbf{U} = \boldsymbol{\sigma}_z$.

Tutti i parametri del modello sono funzioni dello spessore della *quantum well*. La proprietà più sorprendente di questo sistema è che il parametro M

di massa (o *gap*) cambia segno quando lo spessore d_{QW} del pozzo quantico viene variato attraverso uno spessore critico d_c ($\cong 6,3$ nm), associandosi a ciò una transizione della struttura della banda elettronica da normale ad una di tipo "invertito", come mostrato in figura 3.2.

Se l'inclusione di $\epsilon(\mathbf{k})$ non chiude il *gap* energetico dovuto a M per un $B \neq 0$, il sistema dovrà essere isolante nel *bulk*. Esiste una transizione di fase topologica da una M positiva ad una M negativa. Tuttavia, il segno di M da solo non può determinare se il sistema è topologicamente banale o non banale. Come visto nel diagramma di fase della figura 1.4, sappiamo che il sistema è in una fase QSH solo per $MB > 0$, e in questo caso esisterà un paio di stati di bordo elicoidali alla frontiera del sistema.

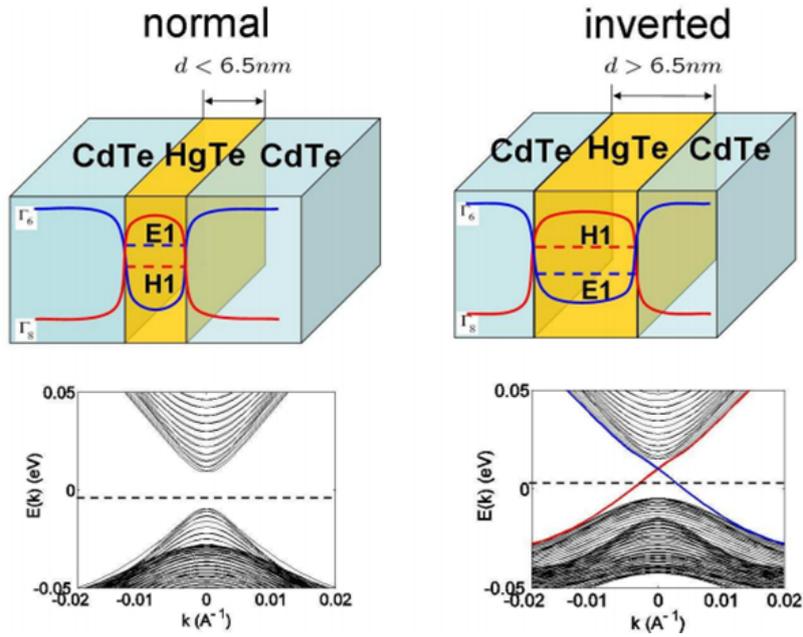


Figura 3.2: Il comportamento di una *quantum well* di tellururo di mercurio-tellururo di cadmio dipende dallo spessore d_{QW} dello strato di HgTe. A sinistra, per $d_{QW} < d_c$, lo spettro dell'hamiltoniana (3.3) mostra un *gap* tra la banda di valenza e quella di conduzione; a destra, per $d_{QW} > d_c$, sono presenti stati *gapless* sui bordi del campione. Tratta da [5].

3.2 Soluzione esatta degli stati di bordo per il modello Bernevig-Hughes-Zhang

Mostriamo una soluzione esatta per gli stati di bordo nel modello Bernevig-Hughes-Zhang in (3.2), che fu risolto per primi da Zhou e collaboratori.

In questo caso, consideriamo un piano semi-infinito con una condizione al contorno per $y = 0$. Sostituiamo k_y con $k_y = -i\partial_y$. L'hamiltoniana è diagonale a blocchi,

$$\mathcal{H}_{\text{BHZ}}(k_x, -i\partial_y) = \begin{pmatrix} \mathbf{h}_\uparrow(k_x, -i\partial_y) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{h}_\downarrow(k_x, -i\partial_y) \end{pmatrix}, \quad (3.9)$$

dove

$$\mathbf{h}_\uparrow(k_x, -i\partial_y) = \begin{pmatrix} M - B_+(k_x^2 - \partial_y^2) & A(k_x - \partial_y) \\ A(k_x + \partial_y) & -M + B_-(k_x^2 - \partial_y^2) \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

e

$$\mathbf{h}_\downarrow(k_x, -i\partial_y) = \begin{pmatrix} M - B_+(k_x^2 - \partial_y^2) & -A(k_x + \partial_y) \\ -A(k_x - \partial_y) & -M + B_-(k_x^2 - \partial_y^2) \end{pmatrix}, \quad (3.11)$$

con $B_\pm = B \pm D$.

I due blocchi \mathbf{h}_\uparrow e \mathbf{h}_\downarrow descrivono stati di spin up e down, rispettivamente. Il problema agli autovalori può essere risolto separatamente per i due blocchi up e down.

Risolviamo il primo blocco, abbiamo

$$\mathbf{h}_\uparrow \Psi_\uparrow = E \Psi_\uparrow. \quad (3.12)$$

Consideriamo come funzione d'onda di prova del tipo

$$\Psi_\uparrow = \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} e^{\lambda y}, \quad (3.13)$$

e la sostituiamo in (3.12). L'equazione caratteristica ci dà

$$\det \begin{pmatrix} M - B_+(k_x^2 - \lambda^2) - E & A(k_x - \lambda) \\ A(k_x + \lambda) & -M + B_-(k_x^2 - \lambda^2) - E \end{pmatrix} = 0. \quad (3.14)$$

Otteniamo quattro radici reali $\pm\lambda_1$ e $\pm\lambda_2$:

$$\lambda_{1,2}^2 = k_x^2 + F \pm \sqrt{F^2 - \frac{M^2 - E^2}{B_+ B_-}}, \quad (3.15)$$

dove

$$F = \frac{A^2 - 2(MB + ED)}{2B_+B_-}. \quad (3.16)$$

Per trovare una soluzione di stato di bordo, la funzione d'onda deve andare a zero lontano dalla frontiera. Adottiamo condizioni al contorno di Dirichlet $\Psi_{\uparrow}(k_x, y = 0) = \Psi_{\uparrow}(k_x, y \rightarrow \infty) = \mathbf{0}$.

Quindi, la soluzione ha una forma generale del tipo

$$\Psi_{\uparrow} = \begin{pmatrix} \tilde{c} \\ \tilde{d} \end{pmatrix} (e^{-\lambda_1 y} - e^{-\lambda_2 y}), \quad (3.17)$$

se λ_1 e λ_2 sono positive o le loro parti reali sono positive. Sostituendo queste soluzioni nella (3.12), si ottiene

$$\frac{\tilde{c}}{\tilde{d}} = \frac{A(k_x + \lambda_1)}{E - M + B_+k_x^2 - B_+\lambda_1^2} = \frac{A(k_x + \lambda_2)}{E - M + B_+k_x^2 - B_+\lambda_2^2}. \quad (3.18)$$

Ne segue che

$$E = M - B_+\lambda_1\lambda_2 - B_+(\lambda_1 + \lambda_2)k_x - B_+k_x^2. \quad (3.19)$$

A $k_x = 0$,

$$E = M - B_+\lambda_1\lambda_2, \quad (3.20)$$

$$\lambda_1 = \sqrt{F + \sqrt{F^2 - (M^2 - E^2)/B_+B_-}}, \quad (3.21)$$

$$\lambda_2 = \sqrt{F - \sqrt{F^2 - (M^2 - E^2)/B_+B_-}}. \quad (3.22)$$

Quindi, si ottengono

$$E = \frac{B_- - B_+}{B_- + B_+}M = -\frac{D}{B}M, \quad (3.23)$$

$$\lambda_1\lambda_2 = \frac{M - E}{B_+} = \frac{M}{B} > 0, \quad (3.24)$$

$$\lambda_1 + \lambda_2 = \sqrt{\frac{A^2}{B_+B_-}} > 0. \quad (3.25)$$

e le condizioni di esistenza di soluzioni di stati di bordo sono

$$\frac{A^2}{B_+B_-} > 0, \quad \frac{M}{B} > 0. \quad (3.26)$$

In prossimità di $k_x = 0$, dalle equazioni per λ_1 , λ_2 ed E , calcoliamo

$$\left. \frac{dE}{dk_x} \right|_{k_x=0} = -B_+ \left. \frac{d(\lambda_1\lambda_2)}{dk_x} \right|_{k_x=0} - B_+(\lambda_1 + \lambda_2) \Big|_{k_x=0} = \text{sgn}(B)A\sqrt{1 - \frac{D^2}{B^2}}. \quad (3.27)$$

Ne segue che lo spettro di energia degli stati di *edge* in prossimità di $k_x = 0$ sia

$$E_{\uparrow}(k_x) = -\frac{MD}{B} + \text{sgn}(B)A\sqrt{1 - \frac{D^2}{B^2}}k_x + O(k_x^2). \quad (3.28)$$

La velocità effettiva di questo stato è

$$v_{\uparrow} = +\text{sgn}(B)A\sqrt{1 - \frac{D^2}{B^2}}. \quad (3.29)$$

Analogamente, possiamo avere la relazione di dispersione per il blocco h_{\downarrow}

$$E_{\downarrow}(k_x) = -\frac{MD}{B} - \text{sgn}(B)A\sqrt{1 - \frac{D^2}{B^2}}k_x + O(k_x^2), \quad (3.30)$$

e la velocità effettiva

$$v_{\downarrow} = -\text{sgn}(B)A\sqrt{1 - \frac{D^2}{B^2}}. \quad (3.31)$$

Quindi, le velocità effettive nei due stati di bordo sono opposte, una è positiva e l'altra è negativa; questi due stati di *edge* costituiscono un paio di stati di bordo elicoidali.

3.3 Misure sperimentali

La transizione da una struttura a bande ordinaria ad una invertita coincide con il passaggio da una fase topologicamente banale di un isolante a quella non banale di un isolante QSH. La prima osservazione sperimentale è dovuta ad un gruppo di ricercatori guidato da Molenkamp in Wurzburg, Germania.

L'idea alla base dell'esperimento è la seguente: il nostro sistema è equivalente ad un sistema a due livelli sovrapposti; in uno dei livelli abbiamo elettroni a spin down in presenza di un campo magnetico entrante mentre nell'altro livello abbiamo elettroni a spin up in presenza di un campo magnetico uscente. Gli elettroni a spin up hanno una conduttanza di Hall positiva, per gli elettroni a spin down quest'ultima è negativa. Quindi, la conduttanza di Hall complessiva del sistema è nulla. Tuttavia, vi è una conduttanza di spin-Hall non nulla.

Sebbene sia difficile misurare sperimentalmente l'effetto spin Hall, la misurazione dell'effetto Hall quantistico di carica elettrica è diventata relativamente comune. Nel nostro sistema, la conduttanza Hall di carica σ_{xy} è nulla per simmetria. Possiamo allora usare la nostra analogia fisica del sistema a due livelli.

In ciascuno dei livelli abbiamo contemporaneamente un effetto Hall quantistico di carica, ma con conduttanza Hall opposta. In corrispondenza del *plateau*, anche la conduttanza longitudinale σ_{xx} è nulla separatamente per gli elettroni spin up e spin down, e quindi è nulla per l'intero sistema. Tuttavia, tra i *plateau* vi saranno picchi diversi da zero. Questa è la caratteristica più facilmente rilevabile del nuovo stato, poiché la misurazione è interamente elettrica.

I risultati di questo esperimento possono essere osservati in figura 3.3, dove sono riportati i valori sperimentali della resistenza longitudinale della *quantum well* con spessore superiore o inferiore a d_c , in funzione della tensione applicata. Si nota immediatamente che nel regime di energia corrispondente al *gap* del *bulk* per QW sottili ($d_{QW} < d_c$) si osserva una resistenza di diversi $M\Omega$, che porta a una conduttanza praticamente nulla, e quindi il materiale può essere considerato un isolante. Per QW più spessi ($d_{QW} > d_c$), si osserva l'esistenza di una resistenza $R \cong 12,9k\Omega$, il cui valore è indipendente dalla temperatura e dalle caratteristiche geometriche del materiale ed è prossimo al valore teorico $R = h/2e^2$.

In figura 3.4 è mostrato il dispositivo a forma di H usato per le misurazioni, con quattro terminali, dove due terminali fungono da sonde di corrente e gli altri due fungono da sonde di tensione.

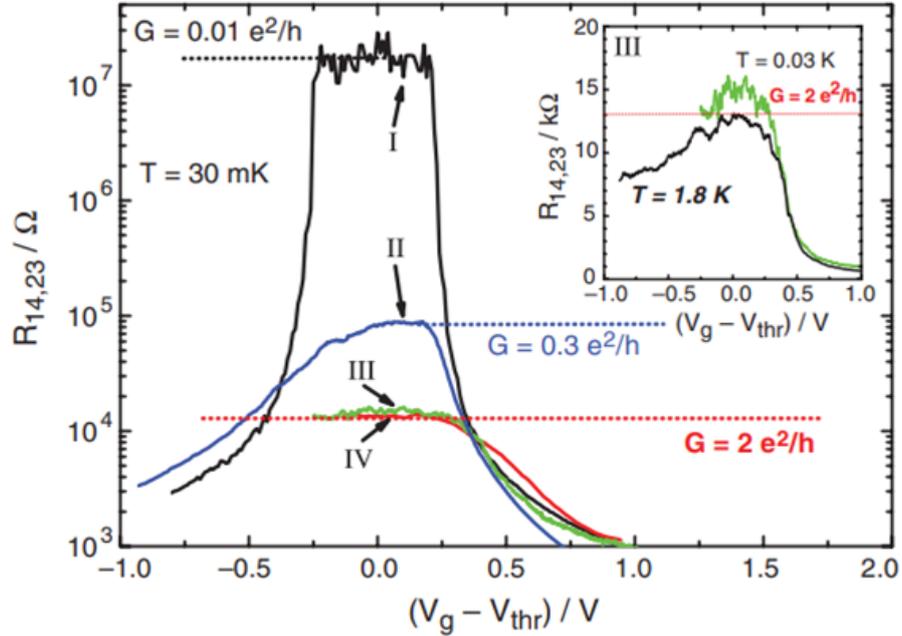


Figura 3.3: La resistenza longitudinale $R_{14,23}$, per varie strutture di *quantum wells*, normale ($d_{QW}=5,5$ nm) in (I) e invertite ($d_{QW}=7,3$ nm) in (II, III e IV), in funzione della differenza di potenziale applicata misurata per $B=0$ T e $T=30$ mK. Le dimensioni del dispositivo sono $(20,0 \times 13,3) \mu\text{m}^2$ per I e II; $(1,0 \times 1,0) \mu\text{m}^2$ per III; $(1,0 \times 0,5) \mu\text{m}^2$ per IV. L'inserto mostra $R_{14,23}(V_g)$ di due campioni dallo stesso *wafers*, con le stesse dimensioni del dispositivo di (III) a 30 mK (linea verde) e 1,8 K (linea nera).

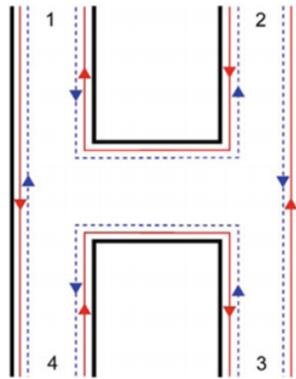


Figura 3.4: Schematizzazione del dispositivo a forma di H utilizzato per le misurazioni.

Conclusioni

In questo lavoro di tesi, ci si è occupati dello studio di isolanti topologici 2D a partire dall'equazione di Dirac modificata.

Nel primo capitolo, si è presentata l'equazione originale di Dirac, mostrandone le soluzioni per stati legati ed evidenziandone le analogie con il comportamento di un isolante topologico. Tuttavia, l'equazione di Dirac in sé non è adatta per il nostro scopo, poiché non permetterebbe alcuna distinzione tra isolanti ordinari, topologicamente banali, ed isolanti topologici, topologicamente non banali. Si è allora ricorsi ad un termine correttivo aggiuntivo, che, come visto tramite l'introduzione dell'indice \mathbb{Z}_2 , permette una distinzione topologica tra le due fasi della materia.

Nel secondo capitolo, si è presentato il modello di Kane e Mele che descrive lo stato spin-Hall quantistico e si è mostrata matematicamente la robustezza degli stati di bordo.

Nel terzo capitolo, si è presentato il modello di Bernevig, Hughes e Zhang che prevede l'esistenza del primo isolante topologico 2D in pozzi quantici di HgTe/CdTe, realizzati sperimentalmente ad un anno dalla predizione teorica.

In questo lavoro, si sono descritti isolanti topologici limitatamente al caso bidimensionale. La generalizzazione di isolante topologico da 2 a 3 dimensioni non è semplice.

Infatti, se nel caso 2D vi è un singolo invariante topologico \mathbb{Z}_2 che distingue lo stato QSH dall'isolante ordinario, nel caso 3D vi è bisogno di quattro invarianti \mathbb{Z}_2 che differenziano l'isolante ordinario dagli isolanti topologici "deboli" e "forti". Per un isolante topologico debole, sebbene vi siano stati *gapless* alla superficie, gli stati superficiali non sono resistenti al disordine o alle impurità. In un isolante topologico forte, invece, gli stati superficiali sono protetti dalla simmetria di inversione temporale e sono quindi robusti contro impurezze.

Gli studi teorici e sperimentali di questi nuovi materiali, isolanti topologici, procedono a ritmi elevati, perché ne sono notevoli le applicazioni tecnologiche. Le applicazioni più promettenti sono i dispositivi spintronici e i transistor privi di dissipazione per computer quantistici. Inoltre, i materiali isolanti topologici hanno trovato applicazioni pratiche in dispositivi magnetoelettronici e optoelettronici avanzati.

Bibliografia

- [1] C. L. Kane e E. J. Mele. « \mathbb{Z}_2 Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect». In: *Physical Review Letters* 95.14 (set. 2005). ISSN: 1079-7114. DOI: [10.1103/physrevlett.95.146802](https://doi.org/10.1103/physrevlett.95.146802). URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.95.146802>.
- [2] C. L. Kane e E. J. Mele. «Quantum Spin Hall Effect in Graphene». In: *Physical Review Letters* 95.22 (nov. 2005). ISSN: 1079-7114. DOI: [10.1103/physrevlett.95.226801](https://doi.org/10.1103/physrevlett.95.226801). URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.95.226801>.
- [3] M. König et al. «Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells». In: *Science* 318.5851 (nov. 2007), pp. 766–770. ISSN: 1095-9203. DOI: [10.1126/science.1148047](https://doi.org/10.1126/science.1148047). URL: <http://dx.doi.org/10.1126/science.1148047>.
- [4] Dafang Li e Junren Shi. «Dorokhov-Mello-Pereyra-Kumar equation for the edge transport of a quantum spin Hall insulator». In: *Physical Review B* 79.24 (giu. 2009). ISSN: 1550-235X. DOI: [10.1103/physrevb.79.241303](https://doi.org/10.1103/physrevb.79.241303). URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.79.241303>.
- [5] Xiao-Liang Qi e Shou-Cheng Zhang. «The quantum spin Hall effect and topological insulators». In: *Physics Today* 63.1 (gen. 2010), pp. 33–38. ISSN: 1945-0699. DOI: [10.1063/1.3293411](https://doi.org/10.1063/1.3293411). URL: <http://dx.doi.org/10.1063/1.3293411>.
- [6] Shun-Qing Shen. *Topological Insulators*. Springer Singapore, 2017. DOI: [10.1007/978-981-10-4606-3](https://doi.org/10.1007/978-981-10-4606-3). URL: <https://doi.org/10.1007/978-981-10-4606-3>.
- [7] Bin Zhou et al. «Finite Size Effects on Helical Edge States in a Quantum Spin-Hall System». In: *Physical Review Letters* 101.24 (dic. 2008). ISSN: 1079-7114. DOI: [10.1103/physrevlett.101.246807](https://doi.org/10.1103/physrevlett.101.246807). URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.101.246807>.