

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

Isolanti topologici ed equazione di Dirac modificata

Relatori:

Prof. Carmine Antonio Perroni

Candidato:

Emanuele Valerio Esposito
Matricola N85000632

A.A. 2023/2024

Indice

Introduzione

I.1	Time reversal symmetry	4
I.2	Rottura della time reversal symmetry	6
I.3	Dagli stati chirali a quelli elicali	7
I.4	Numero di Chern e fase di Berry	9

Capitolo 1

Dal modello di Haldane agli isolanti topologici

1.1	Modello SSH	11
1.2	Modello di Jackiw Rebbi	12
1.3	Modello di Haldane	13
1.4	Stati chirali	15
1.5	Isolanti topologici	16
1.6	Invariante topologico \mathbb{Z}_2	17
1.6.1	Calcolo invariante topologico \mathbb{Z}_2 in una dimensione	17
1.6.2	Corrispondenza bulk boundary	21

Capitolo 2

L'equazione di Dirac modificata

2.1	L'equazione di Dirac	22
2.2	Soluzioni per stati legati	23
2.2.1	Soluzione di Jackiw-Rebbi nel caso unidimensionale	23
2.2.2	Caso bidimensionale	25
2.3	La correzione quadratica all'equazione di Dirac	27
2.4	Stati legati per l'equazione di Dirac modificata	28
2.4.1	Caso unidimensionale	28
2.4.2	Caso bidimensionale: stati di bordo elicoidali	29
2.5	Invariante topologico \mathbb{Z}_2	31

Conclusioni	34
-------------------	----

Bibliografia	35
--------------------	----

Introduzione

Il concetto di struttura a bande, tipico della fisica dello stato solido, unitamente a concetti topologici consente di fornire una classificazione dei materiali. 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. Tuttavia, già nel 1980 fu scoperto un fenomeno che evidenziava comportamenti ibridi tra isolanti e conduttori, l'effetto quantistico di Hall (Quantum Hall, QH). Nel QH, il bulk di un campione bidimensionale, soggetto a un forte campo magnetico perpendicolare (la cui presenza rompe la simmetria di inversione temporale), è completamente isolante. La corrente elettrica è trasportata solamente lungo i bordi del campione e la direzione del moto dei portatori di carica su ogni bordo è fissata dalla direzione del campo magnetico agente sul sistema. L'applicazione di un campo elettrico esterno determina un accumulo di carica lungo i bordi che porta alla formazione di un campo elettrico ortogonale al moto delle cariche mobili. Questo campo elettrico indotto genera una differenza di potenziale che è legata alla corrente dalla conduttanza Hall. Si osserva che quest'ultima è quantizzata, può solo avere valori multipli di una quantità minima: $\sigma_H = \frac{2e^2}{h} n$.

Si introduce il concetto di invarianza topologica per classificare gli stati della materia. 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 (entrambe sono caratterizzate dal genere, che è essenzialmente il numero di buchi). In modo simile esistono fasi della materia che sono caratterizzate da quantità intere, le quali quindi per loro stessa natura non possono variare attraverso processi continui (transizioni adiabatiche), ma solo attraverso una transizione di fase globale del materiale.

Il concetto matematico di classificazione topologica può essere applicato a sistemi di materia condensata dotati di gap energetico, come isolanti o semiconduttori. 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. La transizione adiabatica è definita come una modifica dell'hamiltoniana che non annulla il gap di energia. Una fase topologica può essere definita come l'insieme degli stati del sistema connessi da transizioni adiabatiche. In seguito, si è scoperto un altro fenomeno, il Quantum Spin Hall effect (QSH), nel quale non è necessaria la rottura della simmetria di inversione temporale (TRS) per generare uno stato topologicamente non banale. Kane e Mele [Refs. 4-5] generalizzarono un modello di grafene introducendo l'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 rispettivamente per gli elettroni a spin up e spin down. Stati di bordo conduttivi compaiono alla frontiera del sistema. A causa della simmetria per time reversal, si realizzano coppie di Kramer, con elettroni di spin opposti che si propagano in direzioni opposte. Grazie al teorema di Kramer, 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

detti elicoidali, richiamando la proprietà dell'elettrone per cui la proiezione dello spin lungo la direzione di propagazione è una costante del moto, detta elicità.

Lo scopo di questo lavoro è quello di descrivere un isolante topologico 2D a partire dallo studio dell'equazione di Dirac modificata. Infatti, i sistemi elettronici topologicamente non banali sono descritti da equazioni simili all'equazione di Dirac alla quale viene apportata una modifica nel termine di massa per renderla topologicamente distinta.

Nel capitolo 1, si delineano le caratteristiche principali di alcuni modelli (SSH, il modello di Haldane del grafene e il modello di Kane e Mele del grafene) attraverso i quali è possibile evidenziare i fenomeni di interesse e vedere come essi siano descrivibili dall'equazione di Dirac. Si introduce l'invariante topologico \mathbb{Z}_2 , necessario a distinguere fasi della materia topologicamente banali e non banali.

Nel capitolo 2, si introduce l'equazione di Dirac, considerandone le soluzioni per stati legati di Jackiw-Rebbi. Viene poi presentata l'equazione di Dirac modificata e saranno mostrate le soluzioni di quest'ultima per stati legati. Infine, si discute la relazione tra l'indice \mathbb{Z}_2 e il termine di massa modificato.

Di seguito si introducono i concetti alla base dello studio degli isolanti topologici come la simmetria di inversione temporale, la fase di Berry e gli stati elicoidali. Si dimostra il teorema di Kramer e si vede come questo implichi la "robustezza" degli stati elicoidali. Il contenuto di questa introduzione si basa sulle idee di alcuni studi pionieristici sugli isolanti topologici bidimensionali (vedere Refs. [4–6]) e sullo studio di alcuni argomenti introduttivi agli isolanti topologici (Refs.[1-2]).

I.1 Time reversal symmetry

È importante analizzare le simmetrie di un sistema fisico in quanto da esse emergono interessanti proprietà fisiche. Un esempio è la simmetria per inversione temporale (time reversal symmetry, TRS). Per una particella con momento lineare \mathbf{p} e spin \mathbf{s} situata nella posizione \mathbf{r} , l'inversione temporale (TR) implica

$$\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}, \quad \mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}, \quad \mathbf{s} \rightarrow -\mathbf{s}. \quad (\text{I.1})$$

Si dice che il sistema è TR invariante se sotto le trasformazioni (I.1) la sua hamiltoniana \hat{h} non cambia. Una siffatta hamiltoniana è, per esempio, quella che descrive una particella libera senza massa di spin $\frac{1}{2}$ che si muove a velocità v

$$\hat{h} = v\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} = \frac{2v}{\hbar} \mathbf{s} \cdot \mathbf{p}, \quad \mathbf{s} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}, \quad (\text{I.2})$$

$$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z), \quad (\text{I.3})$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{I.4})$$

In maniera astratta, la TRS può essere definita come l'invarianza del sistema sotto la trasformazione T

$$T\hat{h}T^{-1} = \hat{h} \Leftrightarrow T\hat{h} = \hat{h}T, \quad (\text{I.5})$$

sotto le condizioni

$$T\mathbf{r}T^{-1} = \mathbf{r}, \quad (\text{I.6})$$

$$T\mathbf{p}T^{-1} = -\mathbf{p}, \quad (\text{I.7})$$

$$T\mathbf{s}T^{-1} = -\mathbf{s}. \quad (\text{I.8})$$

Poiché nella rappresentazione delle coordinate $\mathbf{r} \rightarrow \cdot \mathbf{r}$ e $\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar\nabla$, le (I.6) e (I.7) implicano che T coinvolga la coniugazione complessa C . Quindi $T = UC$, dove U deve essere una matrice unitaria per preservare la norma dello stato e quindi essere coerente con l'interpretazione probabilistica della funzione d'onda. La sola rappresentazione compatibile con (I.8) è $U = \pm i\sigma_y$. Si definisce così l'operazione di inversione temporale (TR)

$$T = i\sigma_y C. \quad (\text{I.9})$$

T è un esempio di operatore antiunitario, in quanto preserva la norma ma il prodotto scalare di due stati $\langle a|b \rangle$ viene mandato nel complesso coniugato $\langle a|b \rangle^*$

$$\langle a|T^\dagger T|b \rangle = \langle a|b \rangle^* = \langle b|a \rangle. \quad (\text{I.10})$$

Inoltre, T ha la proprietà

$$T^2 = -1 \Leftrightarrow T^{-1} = -T. \quad (\text{I.11})$$

Un importante teorema per i sistemi TR invarianti è il teorema di Kramer. Questo stabilisce che ogni livello energetico di un sistema TR invariante di spin semintero è almeno doppiamente degenere. Si considerino due autostati $|+\rangle$ e $|-\rangle$ collegati tra loro da T

$$|+\rangle = T|-\rangle. \quad (\text{I.12})$$

Si vuole dimostrare che se T è una simmetria di \hat{h} allora i due stati corrispondono alla stessa energia e sono ortogonali

$$\hat{h}|+\rangle = E|+\rangle, \quad (\text{I.13})$$

$$\hat{h}|-\rangle = E'|-\rangle, \quad (\text{I.14})$$

$$\hat{h}|+\rangle = \hat{h}T|-\rangle = T\hat{h}|-\rangle = TE'|-\rangle = E'\mathbf{T}|-\rangle = E|+\rangle = E\mathbf{T}|-\rangle, \quad (\text{I.15})$$

$$\begin{aligned} \langle +|-\rangle &= \langle -|T^\dagger T^{-1}|+\rangle = -\langle -|T^\dagger T|+\rangle = -\langle -|+\rangle^* = \\ &= -\langle +|-\rangle. \end{aligned} \quad (\text{I.16})$$

I.2 Rottura della Time reversal symmetry

Per un sistema di elettroni bidimensionale la TRS è rotta da un campo magnetico \mathbf{B} ad esso perpendicolare come in figura 1.1.

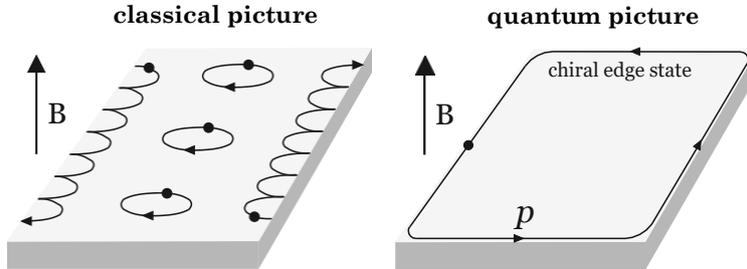


Figura 1.1 Sistema bidimensionale di elettroni in campo magnetico esterno. Ref.[1]

Gli elettroni in vicinanza del bordo occupano stati che si estendono lungo tutto il perimetro e hanno un momento \mathbf{p} determinato dall'orientazione di \mathbf{B} . Quindi non esistendo stati corrispondenti a $-\mathbf{p}$ non si può avere inversione del moto determinata da fluttuazioni del potenziale elettrostatico (ad esempio dovute a impurità). Questa proprietà è chiamata chiralità ed è una manifestazione della rottura della TRS che spiega il carattere non dissipativo dell'effetto Hall quantistico (QHE). Nell'effetto Hall, a seguito dell'applicazione di un campo magnetico a un sistema 2D di elettroni, è prodotta una d.d.p. V_H relativa ad un campo di direzione trasversa al moto dei portatori di carica della corrente I . La conduttanza Hall $\sigma_H = \frac{I}{V_H}$ risulta quantizzata

$$\sigma_H = \frac{2e^2}{h} n, \quad n = \pm 1, \pm 2, \dots \quad (\text{I.17})$$

La corrente I non genera un riscaldamento resistivo in quanto la direzione del flusso di corrente è ortogonale al campo elettrico e quindi il momento lineare degli elettroni non può essere trasferito all'intero sistema (l'energia di interazione con il campo magnetico si trasforma nell'energia cinetica dei portatori di carica ma non in energia termica). Questo trasporto non dissipativo è attribuito agli stati chirali di bordo che sono capaci di trasportare la carica elettrica senza modificare il proprio momento e quindi senza trasferirlo al resto del sistema determinando il riscaldamento. Il mancato riscaldamento significa che non ci sono portatori mobili di carica nel bulk e quindi che esiste un gap energetico tra gli stati di bulk. Quindi gli stati di edge devono per forza esistere tra le bande di valenza e di conduzione come mostrato in figura 1.2. Il ragionamento fatto continua a valere fintantoché il gap energetico rimane aperto; perciò, si dice che gli edge sono "robusti" rispetto alle deformazioni adiabatiche delle bande.

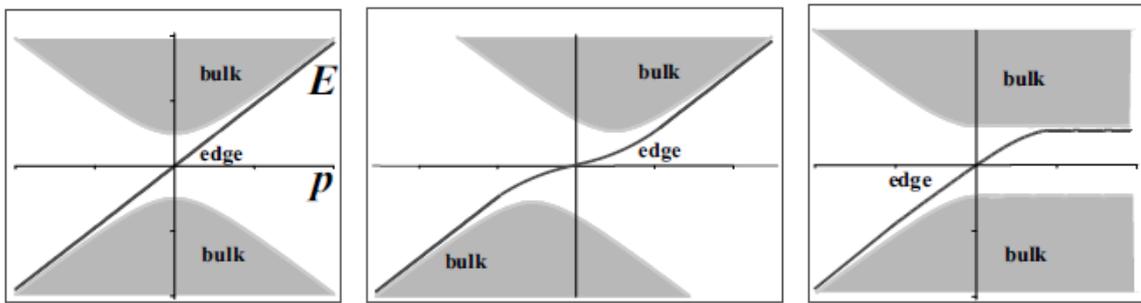


Figura 1.2 Livelli energetici QHE. Ref.[1]

I.3 Dagli stati chirali a quelli elicali

Gli isolanti topologici bidimensionali (2D topological insulator, 2DTI) sono materiali nei quali esistono stati di edge in assenza di un campo magnetico esterno e quindi senza rompere la TRS. Uno stato di bordo di un 2DTI può essere visto come due stati di edge contropropaganti con spin opposto in un campo magnetico nullo. Ciò è possibile grazie alla proprietà di accoppiamento tra lo spin \mathbf{s} e il momento lineare \mathbf{p} dell'elettrone chiamata elicità e all'accoppiamento spin-orbita tra \mathbf{s} e il momento angolare \mathbf{l} . Lo spin-orbita può essere visto come dovuto all'azione di un campo magnetico efficace \mathbf{B}_{eff} il cui verso è determinato dal verso di \mathbf{s} e \mathbf{p} . Se \mathbf{s} è diretto verso l'alto e \mathbf{p} verso destra allora \mathbf{B}_{eff} è diretto anch'esso verso l'alto come mostrato in figura 1.3.

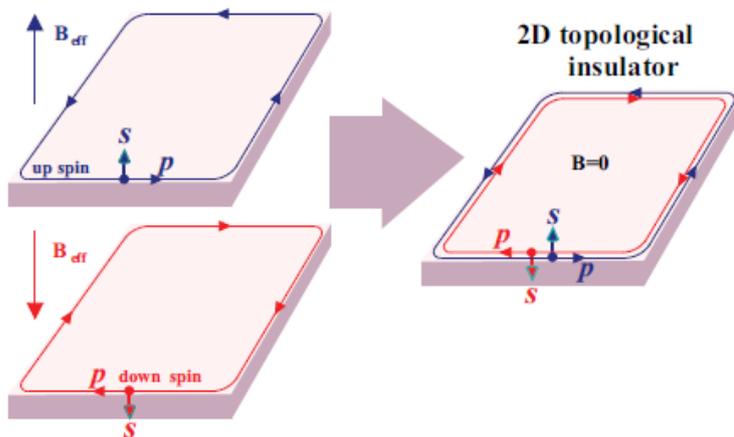


Figura 1.3 Stati elicali come coppia di stati chirali contro-propaganti. Ref.[1]

Se si inverte $\mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}$ e $\mathbf{s} \rightarrow -\mathbf{s}$ allora \mathbf{B}_{eff} si inverte e l'elettrone continuerà a girare in senso antiorario rispetto a \mathbf{B}_{eff} , quindi i due sistemi avranno la stessa energia. Ciò può essere compreso analizzando il termine di spin-orbita dell'hamiltoniana ($\propto \mathbf{s} \cdot \mathbf{l}$), in quanto invertire \mathbf{s} e \mathbf{p} significa invertire \mathbf{s} e \mathbf{l} e quindi il termine di spin-orbita non

cambia segno. Poiché per l'elicità se si inverte \mathbf{s} si deve invertire \mathbf{p} allora i due stati $|+\rangle = (\mathbf{s}_+, \mathbf{p}_+)$ e $|-\rangle = (\mathbf{s}_-, \mathbf{p}_-)$ sono i time reversed l'uno dell'altro e poiché in entrambi i casi il termine di spin orbita ha lo stesso segno, essi sono degeneri come previsto dal teorema di Kramer. Si avrà una struttura dei livelli come quella in figura 1.4.

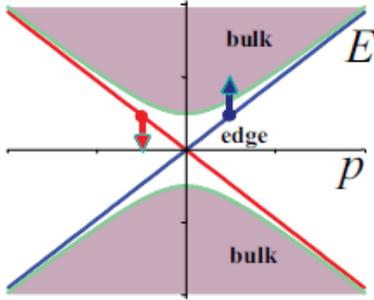


Figura 1.4 Livelli stati elicali nel gap tra i livelli di bulk. Ref.[1]

L'assenza di scattering tra $|+\rangle$ e $|-\rangle$ è dovuta proprio al fatto che $|+\rangle = T|-\rangle$, infatti si ha

$$\langle + | \hat{V} | - \rangle = 0, \quad (\text{I. 18})$$

dove \hat{V} è il potenziale di scattering TR-invariante

$$T \hat{V} T^{-1} = \hat{V}. \quad (\text{I. 19})$$

Da (I.19), (I.11) e (I.12) segue

$$\langle + | \hat{V} | - \rangle = \langle - | T^\dagger \hat{V} T^{-1} | + \rangle = -\langle - | T^\dagger \hat{V} T | + \rangle = -\langle - | T^\dagger T \hat{V} | + \rangle = -\langle - | \hat{V} | + \rangle^* = -\langle + | \hat{V}^\dagger | - \rangle. \quad (\text{I. 20})$$

Per una perturbazione hermitiana $V^\dagger = \hat{V}$ si ha $\langle + | \hat{V} | - \rangle = 0$.

Quindi come si vede in figura 1.5 il moto degli elettroni è insensibile alle irregolarità del potenziale.

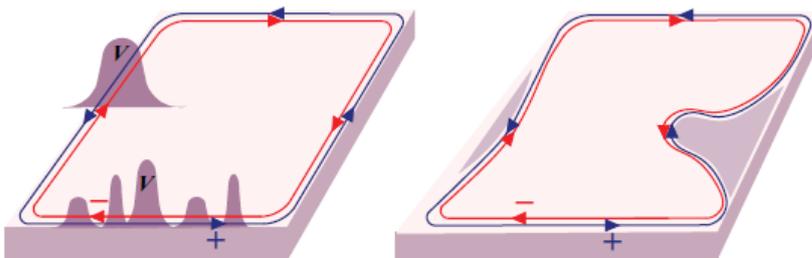


Figura 1.5 Moto stati elicali in potenziale irregolare. Ref.[1]

I.4 Numero di Chern e fase di Berry

Facendo l'assunzione che i materiali trattati siano cristallini è possibile usare la simmetria per traslazioni discrete per labellare gli stati. Secondo il teorema di Bloch, essi possono essere scritti $|\psi(\mathbf{k})\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|u(\mathbf{k})\rangle$, dove $|u(\mathbf{k})\rangle$ è un autostato, periodico sulla cella, dell'hamiltoniana di Bloch

$$H(\mathbf{k}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} H e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (\text{I. 21})$$

$H(\mathbf{k})$ definisce la struttura a bande. Una struttura a bande isolante ha un gap energetico che separa la più alta banda occupata dalla banda più bassa vuota. La simmetria per traslazione del reticolo implica che anche l'hamiltoniana sia periodica con periodo il vettore del reticolo reciproco \mathbf{G} , $H(\mathbf{k} + \mathbf{G}) = H(\mathbf{k})$. Grazie a questa simmetria ci si può restringere a definire il momento del cristallo su un intervallo nel quale $H(\mathbf{k})$ assumerà tutti i valori possibili detto zona di Brillouin, la quale ha la topologia di un toro. Così una struttura a bande isolante può essere vista come una mappa da un toro, la zona di Brillouin, allo spazio delle Hamiltoniane di Bloch con un gap energetico.

Per capire il comportamento dei sistemi a bande, si devono classificare le Hamiltoniane $H(\mathbf{k})$ topologicamente distinte. Ad esempio, una distinzione di fase elettronica si verifica all'interfaccia tra due fasi topologicamente distinte. Si immagini un'interfaccia dove un cristallo lentamente interpola come una funzione della distanza y tra due fasi con le bande invertite (la bonding diventa la banda di conduzione e la anti-bonding di valenza). Ci sarà qualche valore di y tra le due fasi per cui gli stati corrispondenti avranno bassa energia. Quindi si capiscono le due caratteristiche principali degli stati oggetto di studio: essi vivono tra le bande e sono localizzati alla frontiera tra i domini di fase.

La fase di Berry ha un ruolo chiave nello studio della teoria topologica a bande. La fase di Berry è dovuta alla intrinseca ambiguità di fase di una funzione d'onda quantistica. Infatti, gli stati di Bloch determinano le stesse osservabili sotto la trasformazione

$$|u(\mathbf{k})\rangle \rightarrow e^{i\phi(\mathbf{k})}|u(\mathbf{k})\rangle. \quad (\text{I. 22})$$

Questa trasformazione ricorda una trasformazione di gauge elettromagnetica, per cui si definisce un vettore analogo al potenziale vettore, la connessione di Berry

$$\mathbf{A} = -i\langle u(\mathbf{k})|\nabla_{\mathbf{k}}|u(\mathbf{k})\rangle. \quad (\text{I. 23})$$

Sotto (I.22) questa si trasforma come $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla_{\mathbf{k}}\phi(\mathbf{k})$, quindi non è gauge invariante. Tuttavia, l'analogo del flusso magnetico lo è. Per un cammino chiuso C nello spazio \mathbf{k} , si definisce quindi la fase di Berry

$$\gamma_C = \oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{k} = \int_S F d^2\mathbf{k}, \quad (\text{I. 24})$$

dove $F = (\nabla \times \mathbf{A})_z$ definisce la curvatura di Berry. La fase di Berry descrive la fase che lo stato acquista sotto un ciclo adiabatico.

Si consideri l'Hamiltoniana di un sistema a due livelli

$$H(\mathbf{k}) = \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} d_z & d_x - i d_y \\ d_x + i d_y & -d_z \end{pmatrix}. \quad (\text{I. 25})$$

Questa ha autovalori $\pm|\mathbf{d}|$ e poiché gli autovettori possono essere riscritti di un fattore $\pm|\mathbf{d}|$ continuando a corrispondere allo stesso autovalore, è possibile vederli come gli autovettori dell'Hamiltoniana ottenuta con il vettore unitario $\hat{\mathbf{d}} = \frac{\mathbf{d}}{|\mathbf{d}|}$, il quale può essere visto come un punto su una sfera unitaria. Si può mostrare che per un cammino chiuso C la fase associata allo stato fondamentale è

$$\gamma_C = \frac{1}{2} \left(\text{angolo solido sotteso da } \hat{\mathbf{d}}(\mathbf{k}) \right). \quad (\text{I. 26})$$

Quando C corrisponde a una rotazione di 2π di $\hat{\mathbf{d}}(\mathbf{k})$ in un piano, la fase di Berry è π . La curvatura di Berry è data dall'angolo solido in spazio $\hat{\mathbf{d}}(\mathbf{k})$ per unità di area in spazio \mathbf{k} ; è la metà dell'elemento di angolo solido in spazio $\hat{\mathbf{d}}(\mathbf{k})$

$$F = \frac{1}{2} \varepsilon_{ij} \hat{\mathbf{d}} \cdot (\partial_i \hat{\mathbf{d}} \times \partial_j \hat{\mathbf{d}}). \quad (\text{I. 27})$$

Una importante conseguenza di (I.27) è che la curvatura di Berry integrata su uno spazio 2D chiuso (come la 2D zona di Brillouin) è un multiplo di 2π , cioè è uguale al numero di volte che $\hat{\mathbf{d}}(\mathbf{k})$ gira intorno alla sfera come funzione di \mathbf{k} . Questo definisce un invariante topologico chiamato numero di Chern, che per una superficie S può essere espresso come

$$n = \frac{1}{2\pi} \int_S F d^2 \mathbf{k}. \quad (\text{I. 28})$$

La quantizzazione del numero di Chern è più generale che per un sistema a due bande ed è conseguenza del fatto che qualsiasi sia il cammino chiuso C su una superficie chiusa, l'interno di C usato in (I.24) è arbitrario. Quindi l'integrale di superficie della curvatura di Berry sull'esterno di C corrisponde a quello sull'interno a meno di un multiplo di 2π , in quanto solo in tal caso essi apporterebbero delle fasi di Berry equivalenti allo stato del sistema e quindi le osservabili sarebbero le stesse.

Capitolo 1

Dal modello di Haldane agli isolanti topologici

Si introduce il modello SSH, il modello di Haldane per il quantum Hall effect e il modello di Kane e Mele (Refs. [2,4-5]) che prevede il quantum spin Hall effect. Con l'SSH si vuole mostrare come gli stati di edge si originino alla frontiera tra domini topologicamente distinti. Nel modello di Haldane del grafene si vede come la rottura della TRS a causa della presenza di un campo magnetico, implichi la comparsa di stati di edge. Il modello di Kane e Mele consiste nell'introduzione dell'interazione di spin-orbita al modello di tight binding del grafene e si vede come ciò determini la comparsa degli stati elicoidali. L'accoppiamento spin-orbita sostituisce l'azione del campo magnetico, preservando la simmetria temporale del sistema. Si introduce infine l'invariante topologico \mathbb{Z}_2 (Ref.[3]).

1.1 Modello SSH

Il modello SSH rappresenta il modello a due bande più semplice per descrivere i fenomeni topologici. L'hamiltoniana di tight binding è

$$H = \sum_i (t + \delta t) c_{A_i}^\dagger c_{B_i} + (t - \delta t) c_{A_{i+1}}^\dagger c_{B_i} + h.c., \quad (1.1)$$

dove è stata definita la cella unitaria contenente i due atomi A e B. $c_{A_i}^\dagger$ e c_{B_i} sono rispettivamente gli operatori di creazione e distruzione dell'elettrone relativi ai sottoreticoli A e B della cella i -esima. Ignorando lo spin si ha il riempimento delle bande con un elettrone per cella unitaria. Facendo la trasformata di Fourier si ha

$$H = \sum_k H_{ab}(k) c_{ak}^\dagger c_{bk}, \quad (1.2)$$

con

$$H(k) = \mathbf{d}(k) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (1.3)$$

$$d_x(k) = (t + \delta t) + (t - \delta t) \cos(ka),$$

$$d_y(k) = (t - \delta t) \sin(ka), \quad (1.4)$$

$$d_z(k) = 0.$$

È importante notare che $d_z(k) = 0$, infatti ciò significa che $H(k)$ possiede una simmetria “chirale” definita dall’operatore $\Pi = \sigma_z$, che anticommute con $H(k)$. Questo porta a una simmetria elettrone-buca per cui ogni autostato $|u_E\rangle$ con energia E ha un partner chirale $|u_{-E}\rangle = \Pi|u_E\rangle$ con energia $-E$. La fase di Berry è identificata con la polarizzazione P . Ciò si può intuire notando che la polarizzazione è qualcosa del tipo il valore di aspettazione di er , mentre la fase di Berry è qualcosa del tipo il valore di aspettazione di $2\pi i \nabla_k$. Facendo l’identificazione $r \sim i \nabla_k$, segue l’uguaglianza. Per $\delta t > 0$, $d_x(k) > 0$ per tutti i k . In tal modo l’insieme dei punti descritti da $\mathbf{d}(k)$, al variare di k lungo un percorso chiuso nella Brillouin zone, non sottende un angolo solido e $P = 0$. Per $\delta t < 0$, $d_x(k)$ cambia segno passando da $k = \pi/a$ a $k = -\pi/a$, così che $\mathbf{d}(k)$ ruota di 2π portando a una fase di Berry π e $P = e/2$ (figura 1.1). Nel limite di forte accoppiamento $|\delta t| = t$, in cui gli elettroni sono localizzati tra gli atomi della cella unitaria ($\delta t = +t$) oppure tra atomi di due celle ($\delta t = -t$), risulta chiaro che passare da $\delta t = +t$ a $\delta t = -t$ significa spostare ogni elettrone di mezza cella unitaria per cui si ha $P = e/2$. Se non ci fosse la simmetria chirale, $\mathbf{d}(k)$ potrebbe uscire dal piano $d_x d_y$ e P potrebbe variare con continuità in quanto $\mathbf{d}(k)$ potrebbe sottendere un angolo solido qualsiasi. In questo caso tra gli stati $\delta t = +t$ e $\delta t = -t$ non si avrebbe distinzione topologica in quanto non si passerebbe per uno stato corrispondente a $\mathbf{d}(k) = 0$, il quale determina la chiusura del gap e l’inversione delle bande. Infatti, è solo in corrispondenza di $\mathbf{d}(k) = 0$ che gli elettroni passano tutti dall’occupare stati di bonding a stati di anti-bonding liberando così i siti all’estremità del reticolo che potranno ospitare stati di energia 0. Se il cambiamento di polarizzazione avvenisse con continuità la distribuzione di carica degli elettroni si muoverebbe con continuità senza mai lasciare la base di tight binding degli stati di bonding e quindi senza liberare, per nessun k , i siti alle estremità del reticolo. Questo è un esempio di come le simmetrie possono portare a una struttura topologica più ricca.

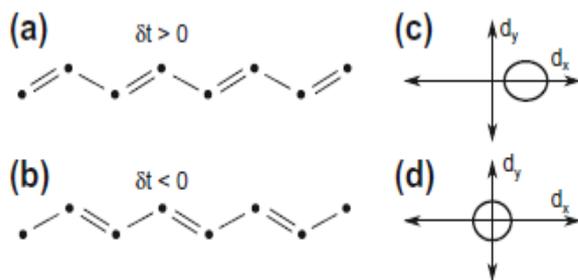


Figura 1.1 (a, b) I due stati fondamentali del modello SSH, (c, d) vettore unitario $\mathbf{d}(k)$. Ref.[2]

1.2 Modello di Jackiw Rebbi

L’interfaccia tra due stati del poliacetilene topologicamente distinti dà origine a uno stato di energia zero al confine tra i domini. In figura 1.2 (a) il punto centrale P può ospitare uno stato localizzato. Ciò è evidente nel limite di forte accoppiamento $|\delta t| = t$ nel quale P rimane spaiato. Per trovare lo stato nel punto P si sviluppa la (1.2) per basse

energie. Nel limite $|\delta t| \ll t$, nelle vicinanze di $k = \frac{\pi}{a}$ si ha uno sviluppo per piccoli q , $k = \frac{\pi}{a} + q$. Questo porta ad una Hamiltoniana

$$H = -i\hbar v_f \sigma_x \partial_x + m \sigma_y, \quad (1.5)$$

con $\hbar v_f = ta$ e $m = 2\delta t$.

Questa ha la forma di una hamiltoniana di Dirac di una particella massiva in 1D con spettro $E(q) = \pm \sqrt{(\hbar v_f q)^2 + m^2}$. Per rappresentare l'inversione delle bande in $x = 0$ si ha che le masse all'infinito devono avere segni opposti $m(x \rightarrow +\infty) < 0$ e $m(x \rightarrow -\infty) > 0$. Una soluzione di energia zero $H|u\rangle = 0$ può essere costruita moltiplicando a sinistra per $i\sigma_x$ e considerando gli autostati $|z \pm\rangle$ di σ_z con autovalori ± 1

$$\psi_0(x) = e^{-\int_0^x m(x')/\hbar v_f dx'} |z +\rangle. \quad (1.6)$$

La soluzione (figura 1.2 b) è sempre localizzata vicino a $x = 0$ indipendentemente dalla forma di $m(x)$ nelle vicinanze, la cosa importante è che cambi segno all'infinito.

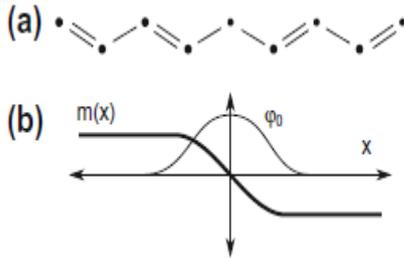


Figura 1.2 (a) Frontiera di domini del modello SSH. (b) Stato nel gap associato a un cambiamento del termine di massa. Ref.[2]

1.3 Modello di Haldane

Il grafene è una forma 2D del carbonio che ha la proprietà di avere le bande di conduzione e di valenza che si toccano in due punti distinti della zona di Brillouin. Vicino a questi due punti la dispersione elettrica è lineare e ricorda quella di una particella relativistica senza massa, la quale è descritta dall'equazione di Dirac. Il modello di tight binding considera gli orbitali p_z per ogni atomo su un reticolo 2D a forma di nido d'api (figura 1.3 a)

$$H_0 = -t \sum_{\langle ij \rangle} c_i^\dagger c_j. \quad (1.7)$$

Essendoci due atomi per cella unitaria si ha un modello a due bande che si può sviluppare in serie di Fourier nella forma di (1.2) e (1.3) con

$$d_x(k) = -t \sum_{p=1}^3 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_p), \quad d_y(k) = -t \sum_{p=1}^3 \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_p), \quad d_z(k) = 0, \quad (1.8)$$

dove $\mathbf{a}_1 = a(0,1)$ e $\mathbf{a}_{2,3} = a(\pm\sqrt{\frac{3}{2}}, -\frac{1}{2})$ sono i vettori più piccoli che vanno dal sotto-reticolo A al sotto-reticolo B. La simmetria sotto l'inversione P e sotto la time reversal T richiedono che $d_z(k) = 0$. Infatti, P implica che $d_z(k) = -d_z(-k)$ e T che $d_z(k) = d_z(-k)$. Essendo $d_z(k) = 0$ esisterà un punto in cui $\mathbf{d}(k) = 0$. Questo si verifica in due punti distinti della zona di Brillouin esagonale $\mathbf{K} = (\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0)$ e $\mathbf{K}' = -\mathbf{K}$. Per piccoli $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{K}$, $\mathbf{d}(\mathbf{q}) = \hbar v_f \mathbf{q}$ con $\hbar v_f = 3ta/2$. Facendo la corrispondenza $\mathbf{q} \rightarrow -i\nabla$, lo sviluppo continuo ha la forma di una hamiltoniana di Dirac senza massa

$$H = -i\hbar v_f (\sigma_x \tau_z \partial_x + \sigma_y \partial_y), \quad (1.9)$$

la quale ha una dispersione lineare $E(q) = \pm \hbar v_f |q|$ (figura 1.3 c). $\tau_z = \pm 1$ rispettivamente vicino a \mathbf{K}/\mathbf{K}' . La degenerazione in $q = 0$ è protetta da P e T , se quindi si rompono queste simmetrie può essere rimossa. Se i due atomi della cella unitaria non sono equivalenti P è violata e questo porta a un termine $d_z(k)$ indipendente da k

$$d_{z(k)}^{CDW} = \lambda_{CDW}. \quad (1.10)$$

Se λ_{CDW} è piccolo, lo sviluppo continuo acquista un termine di massa

$$\Delta H_{CDW} = m_{CDW} \sigma_z, \quad (1.11)$$

con $m_{CDW} = \lambda_{CDW}$.

La dispersione elettronica $E(q) = \pm \sqrt{|\hbar v_f q|^2 + m_{CDW}^2}$ esibisce un gap energetico $2|m_{CDW}|$. Questo stato descrive un isolante normale. Haldane immaginò che la degenerazione in $q = 0$ fosse invece rimossa rompendo la TRS, si ha così il quantum Hall effect. Questo può essere fatto applicando un campo magnetico che è nullo in media, ma che ha le simmetrie spaziali del reticolo. Si può rappresentare ciò con un termine di accoppiamento ai secondi vicini il cui segno dipende da se per andare da p a p' si gira a destra o a sinistra

$$d_z^H(\mathbf{k}) = \lambda^H \sum_{p < p'=1}^3 s_{pp'} \sin(\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_p - \mathbf{a}_{p'})), \quad (1.12)$$

con $s_{pp'} = \pm 1$ quando $p' = p \pm 1 \pmod{3}$. Anche questo termine introduce una massa al punto di Dirac. Poiché $-d_z(k) = d_z(-k)$, le masse a \mathbf{K} e \mathbf{K}' hanno segni opposti

$$\Delta H_H = m_H \sigma_z \tau_z, \quad (1.13)$$

con $m_H = 3\sqrt{3}\lambda_H$. Questo sistema con gap ha degli stati con una conduttanza Hall quantizzata $\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h}$.

La conduttanza Hall può essere capita in termini della fase di Berry. Si può mostrare che l' n che compare nella I.17 è proprio il numero di Chern. Se $m_{CDW} > m_H$, $|\mathbf{d}(k)|$ è diverso da zero ovunque e $\mathbf{d}(k)$ visita il polo nord della sfera di Bloch sia vicino a \mathbf{K} che a \mathbf{K}' . L'angolo solido netto sotteso è così nullo e $\sigma_{xy} = 0$. Per $m_{CDW} < m_H$ le masse a \mathbf{K} e \mathbf{K}' hanno segni opposti, così che $\mathbf{d}(k)$ visita sia il polo nord che il polo sud, e avvolge la sfera una volta. Così $\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h}$. Per $m_{CDW} = m_H$, $d_z(\mathbf{K}) = 0$, così che il sistema è in uno stato senza gap nel punto critico caratterizzato da un fermione di Dirac 2D senza massa.

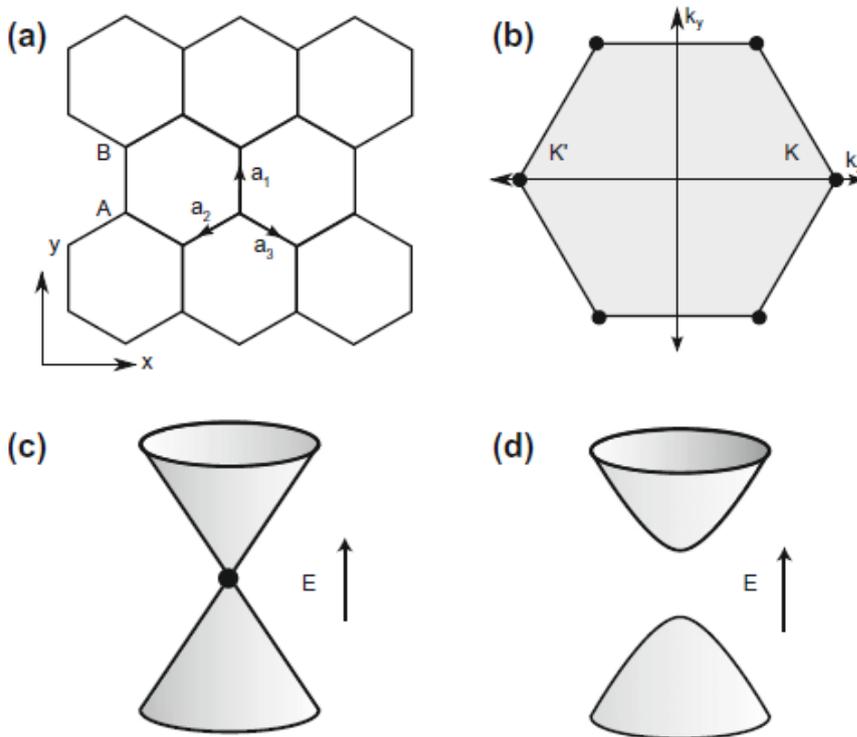


Figura 1.3 (a) Reticolo Grafene. (b) Brillouin zone del grafene con due distinti angoli \mathbf{K} e \mathbf{K}' . (c) Spettro di Dirac senza massa. (d) Spettro di Dirac con massa. Ref.[2]

1.4 Stati chirali

Esistono stati conduttivi senza gap all'interfaccia dove gli invarianti topologici cambiano. Ad esempio, ciò si verifica all'interfaccia tra uno stato quantistico di Hall intero e il vuoto. Questi stati sono chirali nel senso che si propagano solo in una direzione lungo il bordo. L'esistenza di questi stati è collegata alla topologia degli stati di bulk. Gli stati chirali possono essere descritti usando il modello a due bande di Dirac. Si consideri lo sviluppo vicino a \mathbf{K}' con un termine di massa che vari con y in \mathbf{K}' : $m(y) > 0$ per $y > 0$ (bande in \mathbf{K} e \mathbf{K}' concordi, isolante normale) e $m(y) < 0$ per $y < 0$ (bande in \mathbf{K} e \mathbf{K}' invertite, stato quantistico di Hall). La simmetria di traslazione lungo

x ci permette di scrivere $\psi_{q_x}(x, y) = e^{iq_x x} \phi(y)$. Per ogni q_x la soluzione $\phi(y)$ è uguale alla (1.6), e porta a una dispersione di banda

$$E(q_x) = \hbar v_f q_x. \quad (1.14)$$

Questa banda interseca il livello di Fermi E_f con una velocità di gruppo positiva $\frac{dE}{dq_x} = \hbar v_f$ e definisce un modo chirale antiorario lungo il bordo. Se si modifica l'hamiltoniana vicino al bordo si può avere una legge di dispersione diversa ma la differenza, $\Delta n = N_R - N_L$, tra numero di volte che il livello di Fermi è attraversato con velocità positiva N_R e negativa N_L è una costante che dipende dalla variazione del numero di Chern all'interfaccia. In figura 1.4 è mostrato lo stato chirale nel grafene e la configurazione dei livelli.

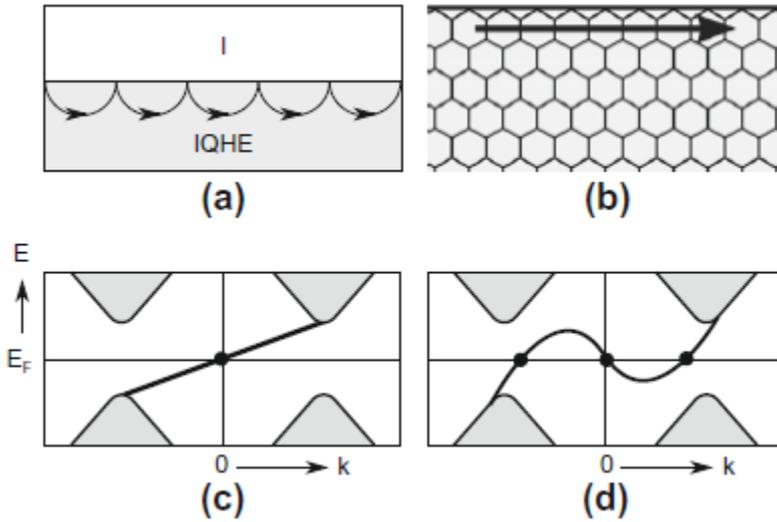


Figura 1.4 (a) Stati di bordo come orbite di ciclotrone, (b) stati di edge del modello di Haldane del grafene, (c,d) stati chirali di edge che connettono le bande di valenza di K' con la banda di conduzione di K . Ref. [2]

1.5 Isolanti topologici

Esiste una classe di strutture a bande isolanti in cui, grazie all'interazione spin-orbita, si hanno stati di superficie senza rompere la TRS. Ciò si verifica ad esempio nel grafene considerando l'interazione di spin-orbita (isolante quantistico spin Hall). Quest'ultima consente un termine di massa nella (1.9) che porta a uno stato di isolante topologico.

Infatti, il grado di libertà di spin consente un termine della forma

$$\delta H_{SO} = \lambda_{SO} \sigma_z \tau_z S_z, \quad (1.15)$$

dove $s_z = \pm 1$ è il grado di libertà di spin. Prese separatamente, le hamiltoniane per $s_z = \pm 1$ violano la TRS e sono equivalenti al modello di Haldane che dà $\sigma_{xy} = \pm \frac{e^2}{h}$. L'applicazione di un campo elettrico porta a una corrente di Hall opposta per $s_z = \pm 1$ e quindi a una corrente totale nulla, ma genera una corrente di spin $J_s = \frac{\hbar}{2e}(J_+ - J_-)$ caratterizzata da una conduttanza spin Hall quantizzata $\sigma_{xy}^s = e/2\pi$. In realtà s_z non si conserva e questa quantizzazione non si verifica. Dal momento che si hanno due copie dello stato Hall quantistico, ci devono essere degli stati di bordo per ciascun sistema. A differenza della conduttanza spin Hall questi stati continuano ad esserci anche quando s_z non si conserva.

Per introdurre lo spin-orbita si inserisce un termine di accoppiamento ai secondi vicini dipendente dallo spin $i\mathbf{s} \cdot (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)$, dove $\mathbf{a}_{1,2}$ sono i vettori che collegano agli atomi più vicini trasversi. Questo termine non rompe le simmetrie del grafene e può essere rappresentato come

$$\Delta H_{SO}(\mathbf{k}) = \lambda_{SO} s_z \sigma_z d_z^H(\mathbf{k}), \quad (1.16)$$

dove $d_z^H(\mathbf{k})$ è data da (1.12). Si hanno due copie time reversed del modello di Haldane come in figura 1.5.

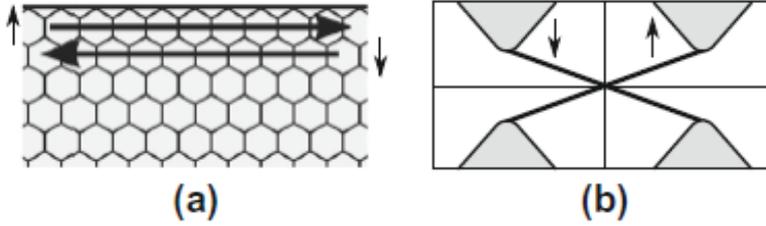


Figura 1.5 Stati chirali contro-propaganti. Ref.[2]

1.6 Invariante topologico \mathbb{Z}_2

1.6.1 Calcolo invariante \mathbb{Z}_2 in una dimensione

Il fatto che gli stati di edge dell'isolante quantistico spin Hall siano robusti al disordine significa che c'è una distinzione topologica tra esso e un isolante ordinario. La simmetria per inversione temporale implica che $[H(\mathbf{r}), T] = 0$, dove l'operatore di inversione temporale $T = -i\sigma_y C$ e C è la coniugazione complessa. Nella teoria a bande la simmetria di inversione temporale significa che

$$TH(\mathbf{k})T^{-1} = H(-\mathbf{k}), \quad (1.17)$$

poiché il buon numero quantico \mathbf{k} corrisponde, a meno di \hbar , all'operatore momento lineare $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ nell'hamiltoniana, il quale sotto T prende un segno negativo. Nella Brillouin zone di un reticolo quadrato, ci sono punti invarianti sotto inversione

temporale $-\Gamma_i = \Gamma_i + n_i \mathbf{G}$, dove \mathbf{G} è il vettore del reticolo reciproco e $n_i = 0,1$. In questi punti, $\Gamma_i = n_i \mathbf{G}/2$,

$$TH(\Gamma_i)T^{-1} = H(\Gamma_i) \quad (1.18)$$

Quindi in questi punti gli autostati sono almeno doppiamente degeneri a causa della degenerazione di Kramer. Una coppia di siffatte bande energetiche $E_{2n-1}(k)$ e $E_{2n}(k)$ è chiamata coppia di Kramer, sono strutturate come in Fig. 1.6. Queste due bande (etichettate come (n, I) e (n, II) , rispettivamente) sono collegate l'una all'altra dall'operazione di inversione temporale a meno di una fase. Il loro incrocio nei punti invarianti è protetto dalla simmetria di inversione temporale.

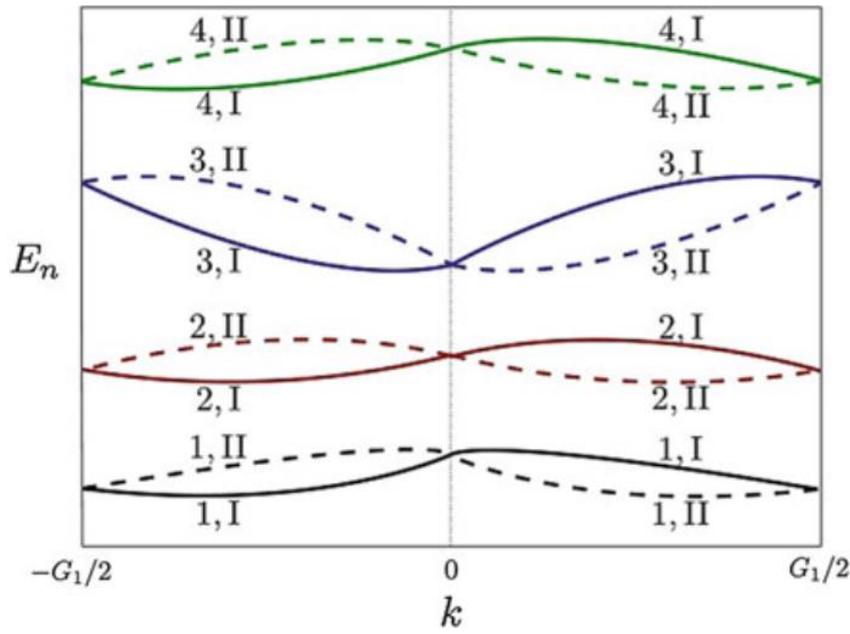


Figura 1.6 Bande di stati coppie di Kramer. Ref.[3]

Se una coppia di Kramer è isolata da un'altra da un gap finito, a essa si può associare un invariante topologico. Per semplicità consideriamo un sistema monodimensionale e supponiamo che esso non abbia altre degenerazioni, oltre a quella dovuta alla simmetria di inversione temporale. Quindi i $2N$ autostati possono essere divisi in N coppie che soddisfano

$$|u_n^I(-k)\rangle = -e^{i\chi_{k,n}T} |u_n^II(k)\rangle. \quad (1.19)$$

La polarizzazione parziale associata con le categorie $s = I$ o II può essere scritta come

$$P^s = \int_{BZ} \frac{dk}{2\pi} A_k^s, \quad (1.20)$$

dove $A_k^s = i\Sigma_n \langle u_n^s(k) | \nabla_n | u_n^s(k) \rangle$ è invariante sotto cambiamenti della fase di $|u_n^I(k)\rangle$ e $|u_n^II(k)\rangle$. Tuttavia, sembra dipendere dalla scelta arbitraria delle etichette I e II assegnate a ogni banda. Per rendere P^s indipendente da questa scelta, separiamo l'integrale in due parti

$$\begin{aligned} P^I &= \int_0^\pi \frac{dk}{2\pi} A_k^I + \int_{-\pi}^0 \frac{dk}{2\pi} A_k^I \\ &= \int_0^\pi \frac{dk}{2\pi} A_k^I + \int_0^\pi \frac{dk}{2\pi} A_{-k}^I \end{aligned} \quad (1.21)$$

Imponendo la TRS

$$\langle Tu_n^II(k) | \partial_k | Tu_n^II(k) \rangle = -\langle u_n^II(k) | \partial_k | u_n^II(k) \rangle, \quad (1.22)$$

si ha

$$A_{-k}^I = A_k^II - \Sigma_n \partial_k \chi_{k,n}. \quad (1.23)$$

Segue che

$$P^I = \int_0^\pi \frac{dk}{2\pi} A_k - \frac{1}{2\pi} \Sigma_n (\chi_{\pi,n} - \chi_{0,n}), \quad (1.24)$$

dove $A_k = A_k^I + A_k^II$.

La polarizzazione di carica per una coppia di stati di Kramer è

$$P_\rho = P^I + P^II \quad (1.25)$$

e la time reversal polarization (TRP) è definita come

$$P_\theta = P^I - P^II. \quad (1.26)$$

Si introduce la matrice $U(2N)$

$$w_{nm}(k) = \langle u_m(-k) | T | u_n(k) \rangle. \quad (1.27)$$

A $k = 0$ e $k = \pi$, w è antisimmetrica. Una matrice antisimmetrica può essere caratterizzata da un Pfaffiano, il cui quadrato è uguale al determinante.

Per un processo ciclico $H(\phi + \bar{\phi}) = H(\phi)$, segue che

$$H(\phi_1^* = 0) = TH(0)T^{-1}, \quad (1.28)$$

$$H(\phi_2^* = \bar{\phi}/2) = TH(\bar{\phi}/2)T^{-1}. \quad (1.29)$$

Il cambiamento della time reversal polarization è gauge invariante

$$\nu = [P_\theta \left(\frac{\bar{\phi}}{2} \right) - P_\theta(0)] \text{ mod } 2. \quad (1.30)$$

Con alcuni calcoli si può mostrare che l'invariante topologico può essere scritto

$$(-1)^{\nu} = \prod_i \frac{\sqrt{\det w(\Gamma_i)}}{Pf(w(\Gamma_i))}. \quad (1.31)$$

Siccome $\det w(\Gamma_i) = [Pf(w(\Gamma_i))]^2$, il lato destro dell'equazione (1.31) è sempre +1 o -1. Quindi ν è solo un intero modulo 2, i.e., 0 o 1. La time reversal polarization definisce due distinti stati di polarizzazione, topologicamente banale ($\nu = 0$) e non banale ($\nu = 1$).

Si può immaginare il sistema come un cilindro attraversato da un flusso magnetico ϕ . L'indice \mathbb{Z}_2 caratterizza il cambiamento nella time reversal polarization quando si varia il flusso da 0 a $\bar{\phi}/2$. La TRP è un indice della degenerazione del sistema dovuta alle coppie di Kramer nei punti invarianti. Un suo cambiamento durante un processo ciclico evidenzia un cambiamento nella degenerazione del sistema, dovuta al modo in cui gli stati corrispondenti ai punti invarianti vengono occupati. Se alcuni di questi ultimi, nel passare da 0 a $\bar{\phi}/2$, passano dall'essere pienamente occupati (singolo determinante di Slater) all'essere occupati a metà (più determinanti di Slater), allora il sistema passa dall'essere non degenerare a degenerare.

Nel caso in cui lo spin si conservi, la presenza o l'assenza della degenerazione di Kramer dipende da se localmente c'è una disparità tra elettroni con spin up e down che possono occupare gli stati degeneri di Kramer nei punti invarianti. Se infatti gli elettroni sono appaiati allora tutte le coppie di Kramer saranno pienamente riempite e quindi non ci sarà degenerazione, se invece sono spaiati alcune coppie saranno piene a metà determinando la degenerazione. L'inserzione di un flusso magnetico $\bar{\phi}/2$ attraverso un sistema topologicamente non banale agisce come una pompa che trasferisce metà degli spin up a sinistra e metà degli spin down a destra. Si ha un eccesso di elettroni con spin down/up localizzato all'estremità destra/sinistra del cilindro che andranno ad occupare in modo parziale alcuni degli stati corrispondenti ai punti invarianti, determinando così un cambiamento nella degenerazione.

Se l'isolante ha anche la simmetria per inversione c'è un modo per calcolare l'invariante \mathbb{Z}_2 .

Si supponga che H abbia anche la simmetria per inversione

$$PH(\mathbf{k})P^{-1} = H(-\mathbf{k}), \quad (1.32)$$

dove l'operatore di parità è definito come

$$P|\mathbf{r}, s_z\rangle = |-\mathbf{r}, s_z\rangle, \quad (1.33)$$

dove \mathbf{r} è la coordinata e s_z è lo spin che non è cambiato in quanto è uno pseudovettore. Una conseguenza della TRS (sotto cui $\mathbf{F}(\mathbf{k})$ è dispari) e della simmetria di inversione (sotto cui $\mathbf{F}(\mathbf{k})$ è pari) è che la curvatura di Berry si annulla

$$\mathbf{F}(\mathbf{k}) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{k}) = 0. \quad (1.34)$$

Si consideri la parità degli stati di banda nei punti TR invarianti Γ_i , le coppie degeneri di Kramer condividono gli stessi autovalori della parità $\xi_{2m}(\Gamma_i)$. In questo caso c'è un semplice algoritmo per il calcolo di ν

$$(-1)^\nu = \prod_i \prod_{m=1}^N \xi_{2m}(\Gamma_i). \quad (1.35)$$

1.6.2 Corrispondenza bulk boundary

In figura 1.7 sono mostrati gli stati elettronici di un sistema isolante 2D TR invariante in funzione del momento lungo il bordo.

Se ci sono stati di bordo il teorema di Kramer richiede che essi siano due volte degeneri nei punti TR invarianti $k_x = \frac{\pi}{a}$ e $k_x = 0$. Lontano da questi punti lo spin-orbita splitterà la degenerazione. Ci sono due modi per connettere gli stati a $k_x = \frac{\pi}{a}$ e $k_x = 0$. In figura 1.7 (a) essi sono connessi a coppie, in questo caso è possibile modificare il sistema per inglobare questi due stati negli stati di bulk senza chiudere il gap tra la banda di valenza e conduzione. Tra $k_x = \frac{\pi}{a}$ e $k_x = 0$ le bande degli stati di edge intersecano l'energia di Fermi E_f un numero pari di volte. Invece in figura 1.7 (b) gli stati di edge non possono essere eliminati senza chiudere il gap, in questo caso le bande degli edge intersecano E_f un numero dispari di volte.

Quale di queste due alternative si verifichi dipende dalla classe topologica della struttura a bande degli stati di bulk. Poiché ogni banda che interseca E_f a k_x ha un partner di Kramer a $-k_x$, la corrispondenza bulk-boundary collega il numero N_k coppie di Kramer dei modi di edge intersecanti E_f al cambiamento dell'invariante all'interfaccia (ad esempio tra il grafene e il vuoto) tramite

$$N_k = \Delta\nu \text{ mod } 2. \quad (1.36)$$

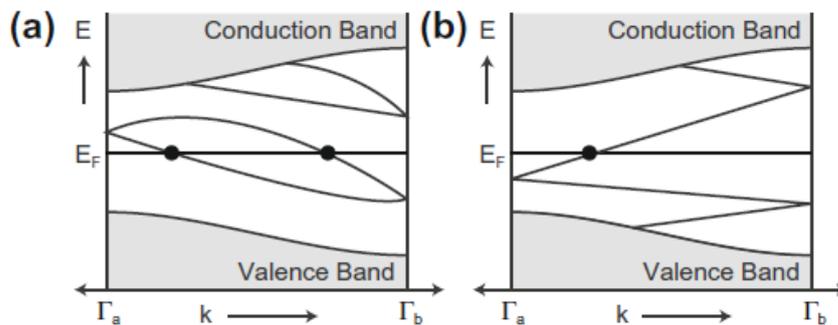


Figura 1.7 Dispersione elettronica tra due punti degeneri di Kramer in funzione del momento lungo il bordo. In (a) il numero di stati di superficie che attraversano E_f è pari, in (b) è dispari. Ref. [2]

Capitolo 2

L'equazione di Dirac modificata

L'equazione di Dirac è fondamentale per descrivere gli isolanti topologici; tuttavia, essa è simmetrica rispetto a particelle con energia positiva e negativa: non c'è distinzione topologica tra particelle a massa positiva e negativa. Quindi è necessario apportare una correzione quadratica, grazie alla quale si ottiene un'equazione atta a dare una distinzione topologica alle strutture a bande. La soluzione per stati legati alla frontiera è determinata dalla struttura a bande del sistema. Si introduce l'indice (\mathbb{Z}_2) che caratterizza la distinzione tra isolanti ordinari e topologici (Ref.[3]).

2.1 L'equazione di Dirac

Nel 1928 Paul A. M. Dirac formulò un'equazione d'onda per la descrizione di una particella a spin 1/2, coerente con i principi sia della meccanica quantistica che della relatività ristretta

$$H = c\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\alpha} + mc^2\beta, \quad (2.1)$$

dove m è la massa a riposo della particella e c è la velocità della luce. α_i e β sono delle matrici, dette di Dirac, che obbediscono alle seguenti regole

$$\alpha_i^2 = \beta^2 = I, \quad (2.2)$$

$$\alpha_i\alpha_j = -\alpha_j\alpha_i, \quad (2.3)$$

$$\alpha_i\beta = -\beta\alpha_i. \quad (2.4)$$

In spazi uni- e bi-dimensionali le matrici di Pauli ($\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$) soddisfano tutte queste regole, infatti

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}I. \quad (2.5)$$

Esse sono

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.6)$$

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

$$\alpha_x = \sigma_x, \quad \beta = \sigma_z. \quad (2.7)$$

In 2D sono proprio le matrici di Pauli

$$\alpha_x = \sigma_x, \quad \alpha_y = \sigma_y, \quad \beta = \sigma_z. \quad (2.8)$$

In 3D, non è possibile avere più di 3 matrici 2×2 che soddisfino le relazioni di anticommutazione, in tal caso le matrici di Dirac sono 4×4 e possono essere espresse in termini delle matrici di Pauli

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & \sigma_0 \end{pmatrix}, \quad (2.9)$$

dove $\sigma_0 = I_2$.

Le proprietà (2.2), (2.3) e (2.4) sono tali che sarà soddisfatta la relazione relativistica di Einstein tra energia e impulso:

$$E^2 = m^2 c^4 + p^2 c^2. \quad (2.10)$$

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

$$E_{\pm} = \pm \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2}. \quad (2.11)$$

Le soluzioni ad energia negativa sono interpretate come antiparticelle, come ad esempio il positrone (stessa massa e spin dell'elettrone ma carica negativa). L'equazione di Dirac può descrivere il moto di un elettrone ad energia positiva attraverso due soluzioni, una per spin up e una per spin down; analogamente, per il positrone si hanno altre due soluzioni ad energia negativa.

Sotto una trasformazione della massa $m \rightarrow -m$, si ha che l'equazione è invariante se sostituiamo $\beta \rightarrow -\beta$, che soddisfa ugualmente le relazioni richieste in (2.2) e (2.4). Quindi l'equazione di Dirac è simmetrica rispetto a particelle con energia positiva e negativa: non c'è distinzione topologica tra particelle a massa positiva e negativa.

2.2 Soluzioni per stati legati

2.2.1 Soluzione di Jackiw-Rebbi nel caso unidimensionale

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

$$h(x) = -iv\hbar\partial_x\sigma_x + m(x)v^2\sigma_z \quad (2.12)$$

e

$$m(x) = \begin{cases} -m_1 & x < 0 \\ m_2 & x \geq 0 \end{cases}, \quad (2.13)$$

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

L'equazione agli autovalori è

$$\begin{pmatrix} m(x)v^2 & -iv\hbar\partial_x \\ -iv\hbar\partial_x & -m(x)v^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1(x) \\ \varphi_2(x) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \varphi_1(x) \\ \varphi_2(x) \end{pmatrix}. \quad (2.14)$$

Possiamo risolvere l'equazione separatamente per $x < 0$ e $x > 0$. La soluzione 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 $x > 0$, si impone una funzione d'onda di prova del tipo

$$\begin{pmatrix} \varphi_1(x) \\ \varphi_2(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi_1^+ \\ \varphi_2^+ \end{pmatrix} e^{-\lambda_+ x}. \quad (2.15)$$

Quindi l'equazione secolare è

$$\det \begin{pmatrix} m_2 v^2 - E & iv\hbar\lambda_+ \\ iv\hbar\lambda_+ & -m_2 v^2 - E \end{pmatrix} = 0, \quad (2.16)$$

da cui si ottengono le soluzioni $\lambda_+ = \pm\sqrt{m_2^2 v^4 - E^2}/v\hbar$.

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. Per $m_2^2 v^4 > E^2$ le soluzioni sono reali e la positiva è quella che rispetta la condizione al contorno per $x \rightarrow +\infty$.

Sostituendo la (2.15) in (2.14) otteniamo la relazione tra le due componenti della funzione d'onda

$$\varphi_1^+ = -\frac{iv\hbar\lambda_+}{m_2 v^2 - E} \varphi_2^+. \quad (2.17)$$

Analogamente, per $x < 0$, si ha

$$\begin{pmatrix} \varphi_1(x) \\ \varphi_2(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi_1^- \\ \varphi_2^- \end{pmatrix} e^{-\lambda_- x}, \quad (2.18)$$

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

$$\varphi_1^- = -\frac{iv\hbar\lambda_-}{m_1 v^2 + E} \varphi_2^-. \quad (2.19)$$

Per $x = 0$ la condizione di continuità richiede che

$$\begin{pmatrix} \varphi_1^+ \\ \varphi_2^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi_1^- \\ \varphi_2^- \end{pmatrix}, \quad (2.20)$$

da cui segue

$$-\frac{\sqrt{m_2^2 v^4 - E^2}}{m_2 v^2 - E} = \frac{\sqrt{m_1^2 v^4 - E^2}}{-m_1 v^2 - E}. \quad (2.21)$$

Esiste quindi una soluzione di energia zero, a cui corrisponde la funzione d'onda

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{v}{\hbar} \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} e^{-|m(x)v x|/\hbar}. \quad (2.22)$$

La soluzione è localizzata vicino a $x = 0$ e decade esponenzialmente allontanandosi dalla giunzione tra le due regioni, come mostrato in figura 2.1. La soluzione esiste anche quando $m_2 \rightarrow +\infty$; in questo caso $\psi(x) \rightarrow 0$ per $x > 0$. In tal senso, se consideriamo il vuoto come un sistema con massa positiva infinita e si rilassa la condizione di continuità, 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. Si può ottenere una soluzione di energia zero localizzata alla frontiera tra due domini di massa con segni opposti ($m \rightarrow +\infty$ e $m \rightarrow -\infty$ differiscono di un segno) anche nel caso in cui la massa vari con continuità vicino a $x = 0$.

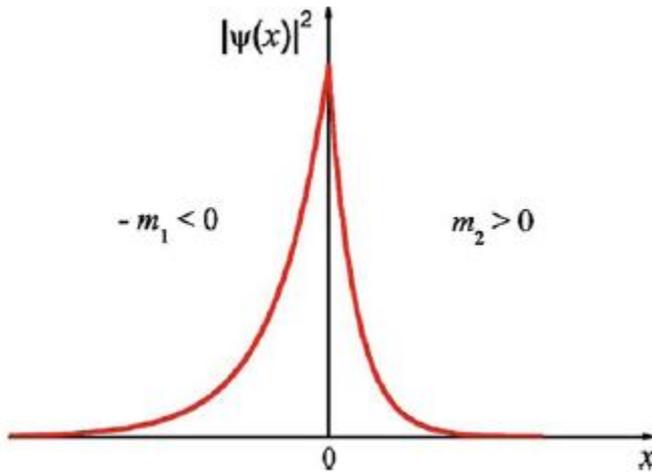


Figura 2.1 Densità di probabilità di $\psi(x)$. Ref.[3]

2.2.2 Caso bidimensionale

In due dimensioni, consideriamo un sistema con un'interfaccia parallela all'asse \hat{y} , con $m(x)$ che ha la stessa espressione (2.13) 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 è

$$H = v p_x \alpha_x + v p_y \alpha_y + m(x) v^2 \beta, \quad (2.23)$$

la quale può essere ricondotta ad un set di due equazioni indipendenti 2×2

$$h_{\pm} = vp_x\sigma_x \pm vp_y\sigma_y + m(x)v^2\sigma_z. \quad (2.24)$$

In questo caso la funzione d'onda localizzata intorno all'interfaccia ha la forma

$$\psi_{2D}(x, k_y) = \sqrt{\frac{v}{\hbar} \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} e^{-|m(x)vx|/\hbar} e^{ik_y y}. \quad (2.25)$$

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

$$h_{\pm} = H_{1D} \pm H_y, \quad (2.26)$$

con $H_{1D} = vp_x\sigma_x + m(x)v^2\sigma_z$ e $H_y = vp_y\sigma_y$.

Dalla (2.25) si ha

$$(vp_x\sigma_x + m(x)v^2\sigma_z)\psi_{2D} = 0, \quad (2.27)$$

$$\pm vp_y\sigma_y\psi_{2D} = \pm vp_y\psi_{2D}. \quad (2.28)$$

In termini di spinori a 4 componenti, soluzioni della (2.23), si hanno

$$\psi_{2D}^+(x, k_y) = \sqrt{\frac{v}{\hbar} \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ i \end{pmatrix} e^{-|m(x)vx|/\hbar} e^{ik_y y}, \quad (2.29)$$

$$\psi_{2D}^-(x, k_y) = \sqrt{\frac{v}{\hbar} \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix} e^{-|m(x)vx|/\hbar} e^{ik_y y}. \quad (2.30)$$

La relazione di dispersione per i due stati è

$$E_{\pm} = \pm \hbar v k_y, \quad (2.31)$$

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

$$v_{\pm} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_{\pm}}{\partial k_y} = \pm v. \quad (2.32)$$

Ciascuno stato determina una corrente lungo l'interfaccia, tuttavia gli elettroni con spin opposti hanno direzioni opposte. La densità di corrente decade in modo esponenziale allontanandosi dall'interfaccia. Poiché il sistema ha la simmetria di inversione temporale, i due stati sono l'omologo time-reversed l'uno dell'altro (doppietto di Kramer), costituendo all'interfaccia una coppia di stati di bordo elicoidali (autostati dell'elicità, ossia della proiezione dello spin nella direzione del moto). Infatti, i gradi di libertà lungo la frontiera si riducono solo allo spin e gli stati di edge sono autofunzioni della proiezione dello spin lungo l'interfaccia.

2.3 La correzione quadratica all'equazione di Dirac

Abbiamo visto che l'equazione di Dirac ha soluzioni di stati legati all'interfaccia tra due mezzi con masse positive e negative, con analogie al comportamento di un isolante topologico. Infatti, assumendo che il vuoto sia un isolante con massa (e quindi energia di gap) positiva infinita, se rilassiamo la condizione di continuità della funzione d'onda un sistema con massa negativa avrà degli stati legati lungo il bordo. 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 (2.1)

$$H = v\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\alpha} + (mv^2 - B\mathbf{p}^2)\beta, \quad (2.33)$$

dove B^{-1} ha le dimensioni di una massa. Il termine quadratico rompe la simmetria tra masse di segno opposto (non esiste una trasformazione unitaria che fa passare dallo spazio di Hilbert associato al sistema a massa negativa a quello associato al sistema a massa positiva) e rende questa equazione topologicamente distinta dall'equazione originale di Dirac: i due sistemi hanno una dinamica diversa.

Per mostrarlo, vediamo la distribuzione di spin allo stato fondamentale nello spazio dei momenti, in figura 2.2. A $p = 0$, l'orientazione dello spin è determinato da $mv^2\beta$ e quindi dal segno di m mentre per grandi valori di p , è determinato prevalentemente da $-Bp^2\beta$ 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} a quella \hat{x} di \mathbf{p} 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 per $p = 0$, determina una distinzione topologica in base al segno di mB . Quindi fissato il segno di B , a differenza dell'equazione di Dirac, il segno della massa determina una struttura topologica distinta dello spazio dei gradi di libertà del sistema e quindi differenti valori degli invarianti topologici i quali sono determinati da integrali il cui valore è legato alla struttura dello spazio dei gradi di libertà.

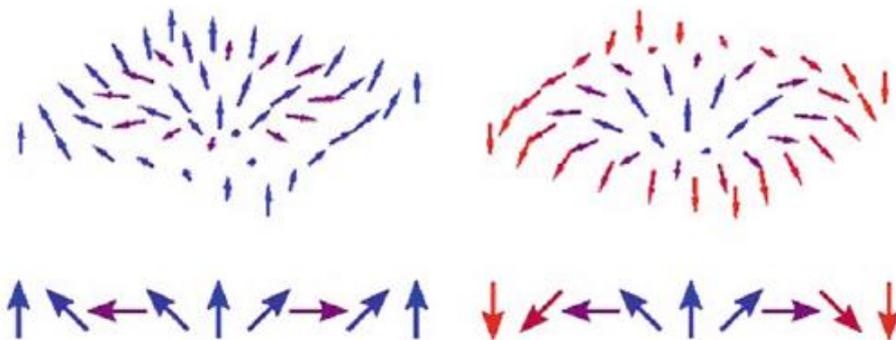


Figura 2.2 L'orientazione dello spin nello spazio dei momenti. A sinistra il caso $mB < 0$, con spin paralleli a $p = 0$ e $p = +\infty$. A destra, il caso $mB > 0$, con spin antiparalleli a $p = 0$ e $p = +\infty$. In basso, l'orientazione dello spin lungo l'asse \hat{p}_x . Ref.[3]

2.4 Stati legati per l'equazione di Dirac modificata

2.4.1 Caso monodimensionale

Analizziamo inizialmente il caso 1D. L'hamiltoniana è

$$H_{1D} = vp_x\sigma_x + (mv^2 - Bp_x^2)\sigma_z. \quad (2.34)$$

Per uno spazio unidimensionale $x \geq 0$, consideriamo una condizione al contorno aperto il che richiede che $\psi(x=0) = 0$. A differenza dell'equazione di Dirac normale adesso è possibile imporre la condizione di continuità al contorno aperto e, per avere soluzioni di stato legato localizzate alla frontiera, richiediamo che $\psi(x \rightarrow \infty) = 0$.

Poiché cerchiamo soluzioni di energia zero, abbiamo

$$[vp_x\sigma_x + (mv^2 - Bp_x^2)\sigma_z]\psi(x) = 0. \quad (2.35)$$

Moltiplichiamo a sinistra per σ_x ottenendo

$$\partial_x\psi(x) = -\frac{1}{v\hbar}(mv^2 + B\hbar^2\partial_x^2)\sigma_y\psi(x). \quad (2.36)$$

Si consideri $\psi(x) = \varphi(x)\chi_\eta$ con $\sigma_y\chi_\eta = \eta\chi_\eta$ con $\eta = \pm 1$. Si ha

$$\partial_x\varphi(x) = -\frac{\eta}{v\hbar}(mv^2 + B\hbar^2\partial_x^2)\varphi(x). \quad (2.37)$$

Con la funzione di prova $\varphi(x) = e^{-\lambda x}$ si ha

$$B\hbar^2\lambda^2 - \eta v\hbar\lambda + mv^2 = 0. \quad (2.38)$$

Richiedendo che siano soddisfatte le condizioni

$$\varphi(x=0) = \varphi(x \rightarrow \infty) = 0, \quad (2.39)$$

otteniamo che le due radici

$$\lambda_\pm = \frac{v}{2|B|\hbar} \left(1 \pm \sqrt{1 - 4mB}\right). \quad (2.40)$$

Le due soluzioni soddisfano la relazione $\lambda_+ + \lambda_- = \eta v\hbar/B$. Per soddisfare le (2.39) esse devono essere positive e solo la soluzione χ_η per cui $\eta = \text{sgn}(B)$ rende la loro somma positiva (v è assunto essere sempre positivo). Inoltre, esse soddisfano anche $\lambda_+\lambda_- = \frac{mv^2}{B\hbar^2}$, quindi nella condizione $mB > 0$ esiste una soluzione

$$\psi(x) = \frac{C}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \text{sgn}(B) \\ i \end{pmatrix} (e^{-\lambda_+x} - e^{-\lambda_-x}), \quad (2.41)$$

con C costante di normalizzazione. L'andamento della densità di probabilità è graficato in figura 2.3.

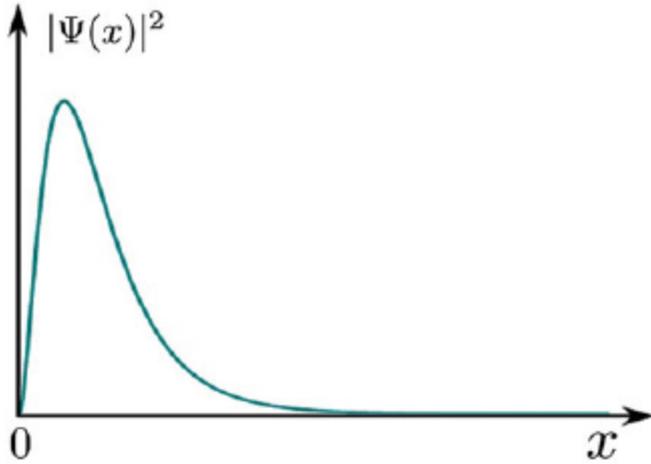


Figura 2.3 Densità di probabilità dello stato di bordo 1D. Ref.[3]

Considerando tutte le 4 componenti

$$\psi_1 = \frac{c}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \text{sgn}(B) \\ 0 \\ 0 \\ i \end{pmatrix} (e^{-\lambda+x} - e^{-\lambda-x}), \quad (2.42)$$

$$\psi_2 = \frac{c}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ \text{sgn}(B) \\ i \\ 0 \end{pmatrix} (e^{-\lambda+x} - e^{-\lambda-x}). \quad (2.43)$$

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

2.4.2 Caso bidimensionale: stati 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

$$H_{2D} = vp_x \alpha_x + vp_y \alpha_y + (mv^2 - Bp^2) \beta. \quad (2.44)$$

Possiamo riscrivere questa equazione come

$$H_{2D} = [vp_x \alpha_x + (mv^2 - Bp_x^2) \beta] + [vp_y \alpha_y - Bp_y^2 \beta] \equiv H_x + H_y. \quad (2.45)$$

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 H_x e usare le soluzioni 1D in (2.42) e (2.43) come base per le soluzioni 2D. Diagonalizziamo quindi H_y nella base $\{\Psi_1, \Psi_2\}$

$$H_{eff} = (\langle \Psi_1 | \langle \Psi_2 |) H_y \begin{pmatrix} | \Psi_1 \rangle \\ | \Psi_2 \rangle \end{pmatrix} = v p_y \operatorname{sgn}(B) \sigma_z. \quad (2.46)$$

In due dimensioni la (2.44) può essere disaccoppiata in due equazioni indipendenti

$$H_{2D} = v p_x \sigma_x + v p_y \sigma_y \pm (m v^2 - B p^2) \sigma_z. \quad (2.47)$$

Le relazioni di dispersione per gli stati legati alla frontiera sono

$$E_{\pm}(p_y) = \pm v p_y \operatorname{sgn}(B), \quad (2.48)$$

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

$$\phi_{1,2}(x, k_y) \approx \Psi_{1,2} e^{i k_y y}. \quad (2.49)$$

Essendo le soluzioni delle (2.47) autostati di σ_y riferiti agli autovalori ± 1 , la direzione di propagazione degli elettroni dipende dal loro spin, up o down. Formano quindi una coppia di Kramer e determinano una coppia di stati di bordo elicoidali. La dipendenza dal segno di B nel modello efficace riflette il fatto che questi stati di bordo scompaiono se $B = 0$. Per ogni sottosistema può essere definito un invariante topologico numero di Chern n_c che si può mostrare essere collegato al numero di bande occupate. È un invariante topologico dal momento che è robusto contro le deformazioni della struttura a bande che lasciano invariato il numero delle bande occupate e, quindi, il numero di zeri nella Brillouin zone. Attraverso la relazione $n_{\pm} = \pm 1/2(\operatorname{sgn}(m) + \operatorname{sgn}(B))$, i segni di m e B determinano il numero di zeri della Brillouin zone e quindi la sua topologia. Infatti, nel passaggio da $n = 0$ a $n \neq 0$ la topologia della Brillouin zone cambia da singolarmente a molteplicemente connessa. Per $mB > 0$ l'invariante topologico è sempre diverso da 0, determinando la comparsa di stati di superficie. Tuttavia, nel nostro caso si hanno due stati con n opposti ($n_{\pm} = \pm 1$) e quindi $n_{tot} = n_+ + n_-$ sarà nullo per cui è necessario introdurre un nuovo invariante topologico per caratterizzare questi stati.

Le soluzioni esatte sono

$$\phi_1 = \frac{c}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \operatorname{sgn}(B) \\ 0 \\ 0 \\ i \end{pmatrix} (e^{-\lambda_+ x} - e^{-\lambda_- x}) e^{i k_y y}, \quad (2.50)$$

$$\phi_2 = \frac{c}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ \operatorname{sgn}(B) \\ i \\ 0 \end{pmatrix} (e^{-\lambda_+ x} - e^{-\lambda_- x}) e^{i k_y y}, \quad (2.51)$$

con λ_{\pm} ora dipendente da p_y

$$\lambda_{\pm} = \frac{v}{2|B|\hbar} \left(1 \pm \sqrt{1 - 4mB + 4B^2 p_y^2 / v^2} \right). \quad (2.52)$$

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

2.5 Invariante topologico Z_2

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 n , detto primo numero di Chern, che compare nella conduttanza di Hall. 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 o dispari di stati di bordo elicoidali.

Le soluzioni generali di funzioni d'onda per un sistema infinito o con condizioni al contorno periodiche sono espresse come

$$\Psi_{\nu} = \mathbf{u}_{\nu}(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - E_{\nu} t) / \hbar}. \quad (2.64)$$

Le relazioni di dispersione delle quattro bande di energia sono

$$E_{p,\nu(=1,2)} = -E_{p,\nu(=3,4)} = \sqrt{v^2 p^2 + (mv^2 - Bp^2)^2}. \quad (2.66)$$

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

$$\mathbf{u}_{\nu}(\mathbf{p}) = \mathbf{S} \mathbf{u}_{\nu}(\mathbf{p} = \mathbf{0}), \quad (2.67)$$

con

$$\mathbf{S} = \sqrt{\frac{\varepsilon_p}{2E_{p,1}}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -\frac{p_z v}{\varepsilon_p} & -\frac{p_- v}{\varepsilon_p} \\ 0 & 1 & -\frac{p_+ v}{\varepsilon_p} & \frac{p_z v}{\varepsilon_p} \\ \frac{p_z v}{\varepsilon_p} & \frac{p_- v}{\varepsilon_p} & 1 & 0 \\ \frac{p_+ v}{\varepsilon_p} & -\frac{p_z v}{\varepsilon_p} & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.68)$$

dove $p_{\pm} = p_x \pm ip_y$, $\varepsilon_p = E_{p,1} + mv^2 - Bp^2$, e $\mathbf{u}_{\nu}(\mathbf{p} = \mathbf{0})$ è uno dei 4 autostati di β . Nella rappresentazione (2.9) delle matrici di Dirac, l'operatore di inversione temporale è definito come $T = -i\alpha_x \alpha_z C$, dove C è l'operatore di coniugazione complessa che dà il coniugato complesso di ogni coefficiente che moltiplica una funzione d'onda.

L'equazione di Dirac modificata è invariante sotto l'inversione temporale

$$T H(\mathbf{p}) T^{-1} = H(-\mathbf{p}) \quad (2.69)$$

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

$$T\mathbf{u}_1(\mathbf{p}) = -i\mathbf{u}_2(-\mathbf{p}), \quad (2.70)$$

$$T\mathbf{u}_2(\mathbf{p}) = +i\mathbf{u}_1(-\mathbf{p}), \quad (2.71)$$

che soddisfano la proprietà $T^2 = -I$.

Analogamente,

$$T\mathbf{u}_3(\mathbf{p}) = -i\mathbf{u}_4(-\mathbf{p}), \quad (2.72)$$

$$T\mathbf{u}_4(\mathbf{p}) = +i\mathbf{u}_3(-\mathbf{p}). \quad (2.73)$$

Quindi le 2 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 Kramer, di energia positiva e negativa, rispettivamente.

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

$$\begin{pmatrix} 0 & i \frac{mv^2 - Bp^2}{E_{p,1}} & -\frac{p_- v}{E_{p,1}} & i \frac{p_z v}{E_{p,1}} \\ -i \frac{mv^2 - Bp^2}{E_{p,1}} & 0 & i \frac{p_z v}{E_{p,1}} & i \frac{p_+ v}{E_{p,1}} \\ i \frac{p_- v}{E_{p,1}} & -i \frac{p_z v}{E_{p,1}} & 0 & i \frac{mv^2 - Bp^2}{E_{p,1}} \\ -i \frac{p_z v}{E_{p,1}} & -i \frac{p_+ v}{E_{p,1}} & -i \frac{mv^2 - Bp^2}{E_{p,1}} & 0 \end{pmatrix} \quad (2.74)$$

ed è antisimmetrica, $\langle \mathbf{u}_\mu(\mathbf{p}) | T | \mathbf{u}_\nu(\mathbf{p}) \rangle = -\langle \mathbf{u}_\nu(\mathbf{p}) | T | \mathbf{u}_\mu(\mathbf{p}) \rangle$. Per le due soluzioni 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 $\varepsilon_{\mu\nu} P(\mathbf{p})$, dove

$$P(\mathbf{p}) = i \frac{mv^2 - Bp^2}{\sqrt{(mv^2 - Bp^2)^2 + v^2 p^2}} \quad (2.75)$$

è lo Pfaffiano della matrice 2×2 . 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 topologicamente banale o 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 $p^2 = mv^2/B$. $\mathbf{p} = 0$ è sempre uno dei momenti time reversal invariati. 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 $G = \frac{2\pi}{a} \rightarrow +\infty$. In questo senso, come limite di un reticolo quadrato gli altri tre momenti time reversal invariati 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 $mB > 0$.

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 sono introdotti alcuni modelli atti a descrivere la comparsa degli stati di edge come stati di bassa energia legati alla frontiera tra domini topologicamente distinti. Si è posta l'attenzione sul ruolo delle simmetrie, in particolare si è visto come le degenerazioni nei punti di Dirac possano essere rimosse, non rompendo la TRS, grazie all'interazione di spin-orbita.

Nel secondo capitolo, si è introdotta l'equazione originale di Dirac, studiandone 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 alla caratterizzazione degli isolanti, poiché il termine di massa è simmetrico rispetto alla trasformazione $m \rightarrow -m$, $\beta \rightarrow -\beta$ non permettendo così alcuna distinzione tra isolanti ordinari ed isolanti topologici. 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.

In questo lavoro, si è fatta una classificazione topologica degli stati a molti corpi che presentano una struttura con gap limitatamente al caso mono- e bi-dimensionale. Viene fatta una grande semplificazione se ci si restringe a considerare una sottoclasse di stati che possono essere descritti dalla teoria a bande dei solidi. Siffatti isolanti a bande possono essere descritti nell'approssimazione a elettroni indipendenti, dove lo stato fondamentale a molti corpi è rappresentato da un determinante di Slater di stati di singola particella. Ciò non significa che le interazioni degli elettroni sono ignorate. L'esistenza di un gap energetico significa che lo stato a molti corpi rimane topologicamente equivalente quando vengono considerate le interazioni di piccola intensità. Si è assunto così che lo stato considerato può essere adiabaticamente connesso con lo stato a elettroni indipendenti e quindi topologicamente classificato mediante la struttura a bande. Quindi è fondamentale capire quando ciò avviene e quindi quando la classificazione topologica fatta con l'utilizzo della struttura a bande persiste anche quando sono aggiunte le interazioni. Inoltre, la generalizzazione di isolante topologico da 2 a 3 dimensioni non è banale. 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 siano presenti stati di superficie per una superficie pulita, rompendo la simmetria per traslazione, è possibile eliminare gli stati superficiali senza chiudere il gap energetico. Il modo più semplice per vederlo è immaginare il sistema 3D come una pila di strati 2D nella quale è aggiunta una dimerizzazione (simile a quella del modello SSH), la quale accoppia fortemente coppie di strati 2D. Il sistema risulta così una pila di isolanti banali. In un isolante topologico forte, invece, gli elettroni superficiali non possono essere localizzati anche per forti disordini, fintanto che il gap energetico del bulk rimane intatto. Essi sono protetti dalla simmetria di inversione temporale e sono quindi robusti contro impurezze.

Bibliografia

- [1] Tkachov G. (2016), Topological insulators. The physics of spin helicity in quantum transport, Pan Stanford Publishing **169**, 978-981-4613-26-2.
- [2] Franz M. e Molenkamp L. (2013), Topological Insulators. Contemporary Concepts of Condensed Matter Science 6, Elsevier **331**, 1572-0934.
- [3] Shun-Qing Shen (2017), Topological Insulators. Dirac equation in condensed matter, Singapore Springer **266**, 978-981-10-4606-3.
url: [Topological Insulators: Dirac Equation in Condensed Matter | SpringerLink](#)
- [4] Kane, C. L. and Mele, E. J. (2005), Quantum spin Hall effect in graphene, Phys, Rev, Lett **95**, 226801.
url: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.95.226801>
- [5] Kane, C. L. and Mele, E. J. (2005), \mathbb{Z}_2 topological order and the quantum Spin Hall effect, Phys, Rev, Lett **95**, 146802.
url: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.95.146802>
- [6] Bernevig, B. A. and Zhang, S.-C. (2006), Quantum spin Hall effect, Phys, Rev, Lett **96**, 106802.
url: [Phys. Rev. Lett. 96, 106802 \(2006\) - Quantum Spin Hall Effect \(aps.org\)](#)