

Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο

Διπλωματική Εργασία

Οπτικές Ιδιότητες Λεπτών Υμενίων από Τοπολογικά Υλικά

Συγγραφέας:
Νικόδημος Βαρνάβα

Επιβλέπων:
Βασίλειος Γιαννόπαπας



Διπλωματική Εργασία για την ολοκλήρωση του Πτυχίου
Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών
Τομέας Φυσικής

8 Ιουλίου 2016

Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο

Διπλωματική Εργασία

Οπτικές Ιδιότητες Λεπτών Υμενίων από Τοπολογικά Υλικά

Συγγραφέας:
Νικόδημος Βαρνάβα

Επιβλέπων:
Βασίλειος Γιαννόπαπας



Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών
Τομέας Φυσικής

Εγκρίθηκε από την τριμελή εξεταστική επιτροπή στις 8 Ιουλίου 2016.

.....
Βασίλειος Γιαννόπαπας	Τσέτσερης Λεωνίδας	Βαρελογιάννης
Επ. Καθηγητής	Αν. Καθηγητής	Γεώργιος Αν.
Ε.Μ.Π.	Ε.Μ.Π.	Καθηγητής Ε.Μ.Π.

8 Ιουλίου 2016

Δικαιώματα

Εγώ ο, Νικόδημος Βαρνάβα, δηλώνω ότι αυτή η διπλωματική με τίτλο, «Οπτικές Ιδιότητες Λεπτών Υμενίων από Τοπολογικά Υλικά» είναι αποκλειστικά δικιά μου. Επίσης δηλώνω ότι:

- Η δουλεία αυτή έγινε κατά την διάρκεια των σπουδών του συγγραφέα και με σκοπό την απόκτηση του πτυχίου.
- Οι απόψεις και τα συμπεράσματα που περιέχονται σε αυτό το έγγραφο εκφράζουν τον συγγραφέα και δεν πρέπει να ερμηνευθεί ότι αντιπροσωπεύουν τις απόψεις του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου.
- Οπουδήποτε έχω συμβουλευτεί δημοσιευμένη δουλεία άλλων, το έχω επισημάνει καθαρά.
- Απαγορεύεται η αντιγραφή, αποθήκευση και διανομή της παρούσας εργασίας, εξολοκλήρου ή τμήματος αυτής για εμπορικό σκοπό.
- Επιτρέπεται η ανατύπωση, αποθήκευση και διανομή της παρούσας εργασίας, εξολοκλήρου ή τμήματος αυτής, για μη κερδοσκοπικούς, εκπαιδευτικούς και ερευνητικούς σκοπούς. Υπό την προϋπόθεση να αναφέρεται η πηγή προέλευσης και να διατηρείται το παρόν μήνυμα.
- Ερωτήματα σχετικά με τη χρήση της εργασίας για κερδοσκοπικό σκοπό, πρέπει να απευθύνονται προς το συγγραφέα.

Υπογραφή: 

Ημερομηνία: **08/07/2016**

Copyright ©Νικόδημος Βαρνάβα,2016
Με επιφύλαξη παντός δικαιώματος. All rights reserved.

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

Περίληψη

Οπτικές Ιδιότητες Λεπτών Υμενίων από Τοπολογικά Υλικά

Στα τοπολογικά υλικά εμφανίζονται έντονα μαγνητό-οπτικά φαινόμενα όταν η συμμετρία αντιστροφής χρόνου σπάσει. Αυτά τα φαινόμενα σε συνδυασμό με την τοπολογική τους φύση τα καθιστούν ιδανικά σε εφαρμογές οπτικής και κβαντικού υπολογισμού. Σε αυτή τη διπλωματική μελετάμε θεωρητικά τις οπτικές ιδιότητες τοπολογικών μονωτών και τοπολογικών ημιμετάλλων *Weyl*.

Στα πρώτα δύο κεφάλαια θέτουμε τις θεωρητικές βάσεις για την μελέτη των τοπολογικών υμενίων. Στο κεφάλαιο 1 αναλύουμε τις ιδιότητες και τις εφαρμογές των μαγνητό-οπτικών υλικών, ενώ στο κεφάλαιο 2 στρέφουμε την προσοχή μας στον καινούργιο κλάδο των τοπολογικών υλικών. Όπου, παρέχουμε τα βασικά εργαλεία για την κατανόηση των ιδιοτήτων των τοπολογικών μονωτών και τον ημιμετάλλων *Weyl*.

Έχοντας αναπτύξει την απαιτούμενη θεωρία στα πρώτα δύο κεφάλαια, συνεχίζουμε με συγκεκριμένα παραδείγματα υμενίων από τοπολογικά υλικά. Ένα τοπολογικό μονωτή, ένα τοπολογικό μονωτή με διαταραχή και ένα ημιμέταλλο *Weyl*. Στο κεφάλαιο 3 γίνεται η μοντελοποίηση και η εξαγωγή του ταυυστή αγωγιμότητας των υλικών, ενώ στο κεφάλαιο 4 μελετάμε τις μαγνητο-οπτικές ιδιότητες των υλικών βασισμένοι στην μοντελοποίηση του προηγούμενου κεφαλαίου.

Κλείνουμε με την ενότητα 4.4, στην οποία συγκρίνουμε τις μεθόδους και τα αποτελέσματα του κεφαλαίου 4. Συγκεκριμένα, χρησιμοποιώντας μια διαφορετική προσέγγιση για τον τοπολογικό μονωτή βρίσκουμε εξάρτηση των οπτικών ιδιοτήτων του υμενίου, από το πάχος του, σε αντίθεση με την προσέγγιση του κεφαλαίου 4. Επίσης βρίσκουμε ότι οι δύο μέθοδοι συμφωνούν στο όριο των πολύ λεπτών υμενίων. Στη συνέχεια συγκρίνουμε τις ιδιότητες του τοπολογικού μονωτή σε σχέση με το ημιμέταλλο *Weyl*. Βρίσκουμε ότι η γωνία *Faraday* για το ημιμέταλλο είναι ενισχυμένη επί ένα παράγοντα πολύ μεγαλύτερο της μονάδας που οδηγεί σε έντονη εμφάνιση του φαινομένου. Τέλος συγκρίνουμε τον αδιατάρακτο με τον διαταραγμένο τοπολογικό μονωτή διαπιστώνοντας ότι ο όρος διαταραχής αίρει τη συμμετρία κατοπτρισμού στο χώρο των ορμών οδηγώντας σε εμφάνιση χειρομορφίας στην απορρόφηση.

NATIONAL TECHNICAL UNIVERSITY OF ATHENS

Abstract

Optical Properties of Thin Films of Topological Matter

Topological materials exhibit strong magneto-optical properties when time reversal symmetry is broken. These strong properties, have a topological nature and this fact renders them strong candidates for applications in optics and quantum computation. In this thesis we study the magneto-optical properties of thin films of topological insulators and Weyl Semimetals.

In the first two chapters we set the theoretical foundations for the study of topological thin films. In chapter 1 we study the properties and applications of magneto-optical materials, and in chapter 2 we focus on the new field of topological matter. Where we provide the necessary tools in order to understand the properties of topological insulators and Weyl Semimetals.

After we have developed the necessary theory in the first two chapters, we turn our attention to specific examples of thin films of topological matter. A topological insulator, a topological insulator with a perturbation and a Weyl Semimetal. In chapter 3 we model and extract the conductivity tensor of these materials and in chapter 4 we study the magneto-optical properties of these materials based on our models from the previous chapter.

We close with section 4.4, where we compare the methods and results of chapter 4. Specifically, we use a different approximation for the study of magneto-optical properties of the topological insulator. In contrast with the results from chapter 4 we find dependence of Kerr and Faraday rotation with the thickness of the thin film. Also the two approximations agree in the limit of very thin films. When we compare the properties of topological insulator with the Weyl semimetal we find that the Faraday angle of the semimetal is multiplied by a factor largely greater than unity, that leads to a strong presence of the Faraday effect. Lastly we compare the unperturbed and the perturbed topological insulator. The perturbation lifts reflection symmetry in momentum space, the result is the emergence of chirality in absorption.

Ευχαριστίες

Θέλω πρώτα απ'όλα να ευχαριστήσω τον επιβλέπων μου και καθηγητή κ. Βασίλειο Γιαννόπαπα για την ανάθεση αυτής της διπλωματικής, την αμέριστη βοήθεια και τις συζητήσεις μας καθ'όλη την διάρκεια αυτής της εργασίας.

Επίσης θα ήθελα να ευχαριστήσω τους φίλους μου και τους συμφοιτητές μου, για την συμπαράσταση και συνεργασία τους τα τελευταία 5 χρόνια στα οποία φοιτώ στο Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο.

Τέλος, δεν μπορώ να βρω τις λέξεις για να εκφράσω την ευγνωμοσύνη στους γονείς μου για την αλτρουιστική τους στήριξη και ώθηση προς την επίτευξη των ονείρων μου. Η διπλωματική αυτή είναι αφιερωμένη σε αυτούς.

Περιεχόμενα

Δικαιώματα	iii
Περίληψη	v
Abstract	vii
Ευχαριστίες	ix
Κατάλογος Σχημάτων	xiii
Συντομεύσεις	xv
Σταθερές	xvii
1 Εισαγωγή	1
1.1 Σκοπός	2
1.2 Δομή Διπλωματικής	3
1.3 Μαγνητό-Οπτικά Υλικά	4
1.3.1 Οπτικός Απομονωτής	4
1.3.2 Μικροσκόπιο <i>Kerr</i>	5
1.3.3 Μαγνητό-Οπτικός Δίσκος	5
2 Τοπολογική Ύλη	7
2.1 Τοπολογική Θεωρία Ζωνών	8
2.1.1 Κβαντική Κατάσταση <i>Hall</i>	9
2.1.2 Το μοντέλο του <i>Haldane</i>	11
2.1.3 Οριακές Καταστάσεις και η Αντιστοιχία Εσωτερικού-Συνόρου	13
2.2 Τοπολογικός Μονωτής Z_2	14
2.3 Τοπολογικά Ημιμέταλλα <i>Weyl</i>	15
3 Μοντελοποίηση Λεπτών Υμενίων Τοπολογικών Υλικών	19
3.1 Το μοντέλο της Χαμιλτονιανής <i>Haldane</i>	19
3.2 Χαμιλτονιανή <i>Dirac</i> με Δευτεροβάθμια Διαταραχή	21
3.3 Μοντελοποίηση Λεπτού Υμενίου από Τοπολογικό Ημιμέταλλο <i>Weyl</i>	25
4 Οπτικές Ιδιότητες Λεπτών Υμενίων	29
4.1 Γιγαντιαία Φαινόμενα <i>Kerr</i> και Φαινόμενα <i>Faraday</i> σε Λεπτά Υμένια Τοπολογικών Μονωτών	29
4.2 Η Επίδραση του Όρου Διαταραχής στις Οπτικές Ιδιότητες του Τοπολογικού Μονωτή	31
4.3 Φαινόμενα <i>Kerr</i> και <i>Faraday</i> σε Τοπολογικά Ημιμέταλλα <i>Weyl</i>	32
4.4 Σύγκριση Αποτελεσμάτων και Σύνοψη	36

4.4.1	Προσέγγιση Υπερλεπτών Υμενίων στον Τοπολογικό Μονωτή	36
4.4.2	Διαφορές Οπτικών Ιδιοτήτων Μεταξύ TI και TWS	39
4.4.3	Φαινόμενα Χειρομορφίας στην Απορρόφηση για την Διαταραγμένη Χαμιλτονιανή του Τοπολογικού Μονωτή	39
	Βιβλιογραφία	41

Κατάλογος Σχημάτων

1.1	Οπτικός Απομονωτής	4
1.2	Μικροσκόπιο <i>Kerr</i>	5
1.3	Μαγνητό-Οπτικός Δίσκος	6
2.1	Κλάσεις Ισοδυναμίας 2Δ Επιφανειών	8
2.2	Μονωτής Vs IQHS	9
2.3	Σχέσεις Διασποράς Γραφενίου	11
2.4	Σύνορο μονωτή και QHS	13
2.5	Z2 Τοπολογικός μονωτής	15
2.6	Τοπολογικό Ημιμέταλλο <i>Weyl</i>	16
2.7	Αγωγιμότητα <i>Hall</i> του Ημιμέταλλου <i>Weyl</i>	16
3.1	Μοντελοποίηση Τοπολογικού Μονωτή	19
3.2	Αγωγιμότητα σαν συνάρτηση του ω	21
3.3	Ο διαταραγμένος κώνος <i>Dirac</i>	23
3.4	Τα στοιχεία του ταυστή αγωγιμότητας $\sigma_{xx}^{\mathcal{R}}(\omega)$ και $\sigma_{xy}^{\mathcal{I}}(\omega)$	24
3.5	Η θέση των κόμβων <i>Weyl</i> στον χώρο των ορμών	25
3.6	Τα στοιχεία του ταυστή αγωγιμότητας για το ημιμέταλλο <i>Weyl</i>	27
4.1	Αγωγιμότητα σαν συνάρτηση του ω	30
4.2	Γωνία <i>Kerr</i> σαν συνάρτηση του ω	31
4.3	Τα στοιχεία του ταυστή αγωγιμότητας $\sigma_{xx}^{\mathcal{R}}(\omega)$ και $\sigma_{xy}^{\mathcal{I}}(\omega)$	32
4.4	Επιτρεπτές οπτικές μεταβάσεις	33
4.5	Τα στοιχεία του ταυστή αγωγιμότητας για το ημιμέταλλο <i>Weyl</i>	34
4.6	Οι γωνίες <i>Kerr</i> και <i>Faraday</i> για το ημιμέταλλο <i>Weyl</i>	36
4.7	Τα στοιχεία του ταυστή αγωγιμότητας για το ημιμέταλλο <i>Weyl</i>	37
4.8	Οι γωνίες <i>Faraday</i> και <i>Kerr</i> για διαφορετικό πάχος υμενίου	38
4.9	Οι γωνίες <i>Faraday</i> και <i>Kerr</i> για διάφορες ενέργειες Φέρμι	38
4.10	Μαγνητό-οπτική Αγωγιμότητα	40

ΣΥΝΤΟΜΕΥΣΕΙΣ

TI	Topological Insulator
TWS	Topological Weyl Semimetal
TE	Transverse Electric
TM	Transverse Magnetic
VSH	Vector Spherical Harmonics
SSB	Spontaneous Symmetry Breaking
QHE	Quantum Hall Effect
IQHS	Integer Quantum Hall State
TFET	Tunnel Field Effect Transistor
MOKE	Magneto Optical Kerr Effect

Σταθερές

Ταχύτητα του Φωτός	$c_0 = 2.997\,924\,58 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$
Φορτίο Ηλεκτρονίου	$e = 1.602\,176\,62 \times 10^{-19} \text{ C}$
Μάζα Ηλεκτρονίου	$m_e = 9.109\,383\,56 \times 10^{-31} \text{ kg}$
Ηλεκτρική Διαπερατότητα του Κενού	$\epsilon_0 = 8.854\,187\,817\,8 \times 10^{-12} \text{ F m}^{-1}$
Μαγνητική Διαπερατότητα του Κενού	$\mu_0 = 1.256\,637\,061\,4 \times 10^{-6} \text{ H m}^{-1}$
Σταθερά του Πλάνκ	$h = 6.626\,070\,04 \times 10^{-34} \text{ J s}$
Σταθερά Λεπτής Υφής	$\alpha = 7.297\,352\,566\,4 \times 10^{-3}$

Κάπου, κάτι εντυπωσιακό περιμένει να ανακαλυφθεί...
Carl Sagan

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

Από τότε που οι αρχαίοι Έλληνες εφήυραν την έννοια του ατόμου, οι επιστήμονες επικεντρώθηκαν στην εύρεση όλο και πιο μικρών δομικών στοιχείων της ύλης. Τον 19ο αιώνα η ανακάλυψη των χημικών στοιχείων όρισε την χρυσή εποχή της χημείας, ενώ η ανακάλυψη των στοιχειωδών σωματιδίων τον 20ο αιώνα έβαλε τα θεμέλια για μια ενοποιημένη θεωρία της φύσης.

Στη Φυσική Συμπυκνωμένης Ύλης, δεν υπάρχουν καινούργια δομικά στοιχεία της ύλης για να ανακαλυφτούν. Αντί αυτού, οι επιστήμονες ενδιαφέρονται για το πως τα υπάρχοντα δομικά στοιχεία μπορούν να “συνεργαστούν” ώστε να δώσουν ζωή σε καινούργιες καταστάσεις της ύλης. Η ανάπτυξη των φυσικών νόμων μέσα από την κβαντομηχανική, τον ηλεκτρομαγνητισμό και την στατιστική φυσική, έδωσαν τα απαραίτητα εργαλεία για να εκτοξευθεί ο κλάδος της Φυσικής Συμπυκνωμένης Ύλης.

Η έρευνα έδωσε ζωή σε εφαρμογές που άλλαξαν την κοινωνία μέσα σε 100 χρόνια. Η ανάπτυξη της θεωρίας των ημιαγωγών, οδήγησε στο τρανζίστορ, τον δομικό λίθο των υπολογιστών. Τώρα η κλασματική κβαντική κατάσταση *Hall* οδηγεί σε τοπολογικά *anions* στα οποία έχει στραφεί το ενδιαφέρον τα τελευταία χρόνια λόγω της δυνατότητας τους να χρησιμοποιηθούν ως ο δομικός λίθος των κβαντικών υπολογιστών.

Αυτά τα οιονεί σωματίδια (*anions*) αποτελούν ένα παράδειγμα τοπολογικής κατάστασης της ύλης. Με τον όρο αυτό εννοούμε ότι παρουσιάζουν ιδιότητες οι οποίες είναι “τοπολογικά σταθερές”. Δηλαδή διάφορες διαταραχές που μπορεί να προκαλούνται από το εξωτερικό περιβάλλον δεν θα μεταβάλουν τις ιδιότητες του υλικού. Αυτή η ιδιότητα των τοπολογικών καταστάσεων της ύλης είναι απαραίτητη για τους κβαντικούς υπολογιστές καθώς τα κβαντικά *bits* είναι υπερευαίσθητα και οδηγούνται σε αποσυννοχή (*decoherence*) πριν ακόμα είναι δυνατός ο κβαντικός υπολογισμός. Τα *anions* με τις τοπολογικές ιδιότητες τους έρχονται να δώσουν λύση σε αυτό το πρόβλημα.

Η μελέτη των τοπολογικών υλικών ξεκίνησε 1980 όταν ο Klaus von Klitzing [11] παρατήρησε ότι, αν σε ένα δισδιάστατο υλικό σε χαμηλή θερμοκρασία εφαρμόσουμε πολύ ισχυρό μαγνητικό πεδίο, η αγωγιμότητα *Hall* σ_{xy} παίρνει τιμές που είναι ακέραια πολλαπλάσια της κβαντικής αγωγιμότητας.

$$\sigma_{xy} = n \frac{e^2}{h}, \quad n \in \mathcal{N}. \quad (1.1)$$

Η κατάσταση έμεινε στασιμη τα επόμενα 25 χρόνια. Το ενδιαφέρον αναζωπυρώθηκε όταν οι επιστήμονες αντιλήφθηκαν [5] ότι οι αλληλεπιδράσεις σπίν-τροχιακού μπορούν να αντικαταστήσουν τον ρόλο που παίζει το ισχυρό μαγνητικό πεδίο και να οδηγήσουν στη κατάσταση της ύλης που ονομάζουμε

“τοπολογικού μονωτή”. Ένας τοπολογικός μονωτής έχει ακριβώς την ίδια συμπεριφορά με ένα κοινό μονωτή στο εσωτερικό του, στην επιφάνεια του όμως υπάρχουν αγώγιμες καταστάσεις. Όπως είπαμε αυτή η συμπεριφορά ως τοπολογική είναι αναισθητή σε διαταραχές. Τα αγώγιμα ηλεκτρόνια στην επιφάνεια του τοπολογικού μονωτή έχουν καθορισμένη χειρομορφία και κατεύθυνση σπίν, ανοίγοντας έτσι το δρόμο σε εφαρμογές τους στη σπιντρονική τεχνολογία.

Η καινούργια οδός που άνοιξαν οι τοπολογικές καταστάσεις της ύλης στη φυσική συμπεκνωμένης ύλης χρήζει έντονης προσοχής. Τόσο όσον αφορά το καθαρά επιστημονικό κομμάτι (την μελέτη μιας καινούργιας κλάσης καταστάσεων), όσο και στο κομμάτι των εφαρμογών. Η ιστορία μας έδειξε ότι καινούργιες καταστάσεις της ύλης, μπορούν να οδηγήσουν σε επαναστάσεις στην τεχνολογία και οι τοπολογικές καταστάσεις της ύλης φαίνεται να έχουν όλα τα φόντα για μια τέτοια επανάσταση.

1.1 Σκοπός

Στη διπλωματική αυτή γίνεται θεωρητική μελέτη των οπτικών ιδιοτήτων λεπτών υμενίων από τοπολογικά υλικά. Συγκεκριμένα μελετάμε πως διάφορα τοπολογικά υλικά αλληλεπιδρούν με διαφορετικό τρόπο όταν προσπίπτει πάνω τους δεξιόστροφα και αριστερόστροφα κυκλικά πολωμένη ακτινοβολία (φαινόμενα χειρομορφίας). Στα τοπολογικά υλικά εμφανίζονται έντονα φαινόμενα χειρομορφίας τόσο ως προς την σχετική διαφορά φάσης (γωνίες *Kerr* και *Faraday* [19],[14]) όσο και ως προς την διαφορετική απορρόφηση [1],[23].

Ο λόγος που εστιάζουμε σε υμένια έγκειται στο ότι τέτοιες γεωμετρίες είναι πιο πιθανό να χρησιμοποιηθούν σε εφαρμογές, όπως TFETs (Tunnel field-effect transistors) [17]. Επιπλέον χρησιμοποιώντας υμένια υπεισέρχεται η παράμετρος του πάχους την οποία μπορούμε να ρυθμίσουμε και έτσι να ενισχύσουμε τα οπτικά φαινόμενα που παρουσιάζουν τα τοπολογικά υλικά.

Λόγω του τοπολογικού χαρακτήρα των υλικών, εμφανίζεται τοπολογική συμπεριφορά και στις οπτικές ιδιότητες των υμενίων. Αυτό είναι κεντρικής σημασίας καθώς οι ιδιότητες είναι αναισθητές σε μικρές αλλαγές των παραμέτρων του υλικού (αλλαγές οι οποίες δεν αλλάζουν την τοπολογική του φάση). Ως εκ τούτου, τέτοια υλικά μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε εφαρμογές που απαιτείται ακρίβεια στη συμπεριφορά του υλικού. Επίσης, μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε συστήματα και περιβάλλοντα όπου η δυνατότητα ελέγχου των συνθηκών δεν είναι δυνατή. Το γεγονός αυτό, λύνει τα χέρια σε πολλά προβλήματα εφαρμογών όπου οι χβαντομηχανικές ιδιότητες υλικών είναι ανεχμετάλλευτες, λόγω της ευαισθησίας τους στο περιβάλλον (*decoherence*).

Αφότου γίνεται μια ανασκόπηση σε διάφορα άρθρα της βιβλιογραφίας στα οποία μελετώνται οπτικές ιδιότητες τοπολογικών υλικών, εφαρμόζουμε και συγκρίνουμε διαφορετικές μεθόδους εύρεσης χειρόμορφων ιδιοτήτων. Η ανάλυση αυτή μας επιτρέπει να δούμε τα όρια και την εφαρμοσιμότητά διαφόρων προσεγγίσεων. Επίσης, συγκρίνουμε τις ιδιότητες μεταξύ διαφορετικών τοπολογικών υλικών, μελετώντας την εξάρτησή τους από διάφορες παραμέτρους. Η σύγκριση αυτή παρέχει την δυνατότητα καλύτερης κατανόησης των ιδιοτήτων και των δυνατοτήτων των τοπολογικών υλικών, οι εφαρμογές των οποίων βρίσκονται σε εμβρυακό στάδιο.

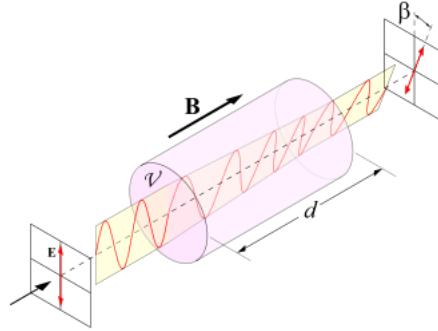
1.2 Δομή Διπλωματικής

Σαν προλούδιο και για να γίνει καλύτερα κατανοητή η ανάγκη για έρευνα στα μαγνητό-οπτικά υλικά, στην επόμενη ενότητα (1.3), θα δούμε τι είναι και ποιες οι βασικές εφαρμογές των μαγνητό-οπτικών υλικών.

Στο κεφάλαιο 2 θα γίνει μια συνοπτική παρουσίαση των τοπολογικών υλικών. Για να καταλάβουμε τα θεωρητικά θεμέλια αυτού του ταχέως αναπτυσσόμενου πεδίου, θα δώσουμε μια εισαγωγή στην Τοπολογική Θεωρία Ζωνών 2.1 και θα εξηγήσουμε την τοπολογική τάξη στο κβαντικό φαινόμενο Hall (Quantum Hall Effect - QHE) και στους τοπολογικούς μονωτές 2.1.2. Επίσης σημαντικό θεώρημα για την κατανόηση της εμφάνισης αγώγιμων καταστάσεων στο σύνορο του υλικού, είναι η “αντιστοιχία εσωτερικού-συνόρου” (bulk-boundary correspondence) και θα αναφέρουμε τα κύρια σημεία 2.1.3. Ενώ θα τελιώσουμε με την περιγραφή του 2Δ τοπολογικού μονωτή 2.2 και του ημιμετάλλου Weyl 2.3.

Έχοντας βάλει τα θεωρητικά μας θεμέλια συνεχίζουμε στο κεφάλαιο 3 με την μοντελοποίηση και μελέτη των ιδιοτήτων των υλικών μέσα από την βιβλιογραφία. Ξεκινάμε με την ενότητα 3.1 όπου δείχνουμε πως μπορεί να μοντελοποιηθεί ένας τοπολογικός μονωτής και καταλήγουμε με την εξαγωγή του τανυστή αγωγιμότητας του υλικού. Στην ενότητα 3.2 μελετάμε την αλλαγή των ιδιοτήτων ενός τοπολογικού μονωτή αν θεωρήσουμε μια διαταραχή (όρος κινητικής ενέργειας) στην Χαμιλτονιανή του. Εστιάζουμε όμως στους όρους του τανυστή αγωγιμότητας που έχουν να κάνουν με την απορρόφηση της ακτινοβολίας. Τέλος στην ενότητα 3.3 δείχνουμε πως μπορεί να μοντελοποιηθεί ένα ημιμέταλλο Weyl και καταλήγουμε με την εξαγωγή του τανυστή αγωγιμότητας του υλικού.

Με τους τρεις διαφορετικούς τανυστές αγωγιμότητας στην διάθεση μας, στο κεφάλαιο 4 προχωράμε με την μελέτη των οπτικών ιδιοτήτων των τοπολογικών υλικών. Ξεκινάμε στην ενότητα 4.1, με τον τανυστή αγωγιμότητας του τοπολογικού μονωτή από την ενότητα 3.1. Βρίσκουμε ότι τα λεπτά υμένα από τοπολογικούς μονωτές παρουσιάζουν γιγαντιαίο μαγνητό-οπτικό φαινόμενο *Kerr*, ενώ το φαινόμενο *Faraday*, παρόλο που είναι μικρό ($< 1^\circ$) έχει ολική (*universal*) συμπεριφορά. Στην ενότητα 4.2 συνεχίζουμε με την μελέτη των ιδιοτήτων της διαταραγμένης Χαμιλτονιανής που παρουσιάστηκε στην ενότητα 3.2. Παρατηρούμε ότι η διαταραχή οδηγεί σε φαινόμενα χειρομορφίας στην απορρόφηση και συγκρίνουμε την διαταραγμένη με την αδιατάραχτη Χαμιλτονιανή. Τέλος μελετάμε τις οπτικές ιδιότητες του ημιμετάλλου Weyl (ενότητα 4.3) όπου ακολουθούμε μια διαφορετική προσέγγιση από την ενότητα 4.2. Πάλι βρίσκουμε ότι η γωνία *Kerr* παρουσιάζει μεγάλες τιμές ($\approx -\frac{\pi}{2}$) με τη διαφορά τώρα ότι έχουμε εξάρτηση από το πάχος του υμενίου και την απόσταση των κόμβων Weyl. Κλείνουμε με την ενότητα 4.4 όπου γίνεται ανάλυση και σύγκριση των αποτελεσμάτων του κεφαλαίου 4. Στην ενότητα 4.4.1 χρησιμοποιούμε την προσέγγιση της ενότητας 4.3 για να βρούμε τις οπτικές ιδιότητες της Χαμιλτονιανής του τοπολογικού μονωτή (ενότητα 3.1). Παρουσιάζουμε τα αποτελέσματα και τα συγκρίνουμε με τα αντίστοιχα αποτελεσμάτα από την ενότητα 4.1. Επίσης δείχνουμε την εξάρτηση των φαινομένων *Kerr* και *Faraday* από διάφορες παραμέτρους, όπως το πάχος του υμενίου και την ενέργεια Φέρμι του υλικού. Η υποενότητα 4.4.2 είναι αφιερωμένη στις ομοιότητες και στις διαφορές που παρουσιάζουν οι μαγνητό-οπτικές ιδιότητες των τοπολογικών μονωτών και των ημιμετάλλων Weyl. Ενώ, κλείνουμε με την υποενότητα 4.4.3 στην οποία συνοψίζονται τα αίτια της εμφάνισης χειρομορφίας στην απορρόφηση όταν



Σχήμα 1.1: Ένας οπτικός απομονωτής αποτελείται από ένα πολωτή, το μαγνητό-οπτικό υλικό και από ένα αναλυτή.

υπεισέρχεται ένας όρος διαταραχής στην Χαμιλτονιανή *Haldane*.

1.3 Μαγνητό-Οπτικά Υλικά

Όπως είπαμε τα τοπολογικά υλικά εμφανίζουν έντονα φαινόμενα χειρομορφίας. Με το επιπρόσθετο πλεονέκτημα της τοπολογικής τους φύσης, μπορούν να αντικαταστήσουν άλλα μαγνητό-οπτικά υλικά σε εφαρμογές παρέχοντας σταθερότητα σε ασταθή περιβάλλοντα. Σε αυτή την υποενότητα θα δούμε τι είναι και ποιές οι εφαρμογές των μαγνητό-οπτικών υλικών.

Σε ένα μαγνητό-οπτικό υλικό, το δεξιόστροφα και το αριστερόστροφα κυκλικά πολωμένο φως έχουν διαφορετικές ταχύτητες, το οποίο οδηγεί σε μια πλειάδα από φαινόμενα [10]. Η εφαρμογή μαγνητικού πεδίου σε ένα μαγνητό-οπτικό υλικό (ή η αυθόρμητη μαγνήτιση σε ένα φερρομαγνητικό υλικό) οδηγεί σε στροφή του επιπέδου πόλωσης του διαδιδόμενου πεδίου (φαινόμενο *Faraday*) και του ανακλώμενου πεδίου (φαινόμενο *Kerr*).

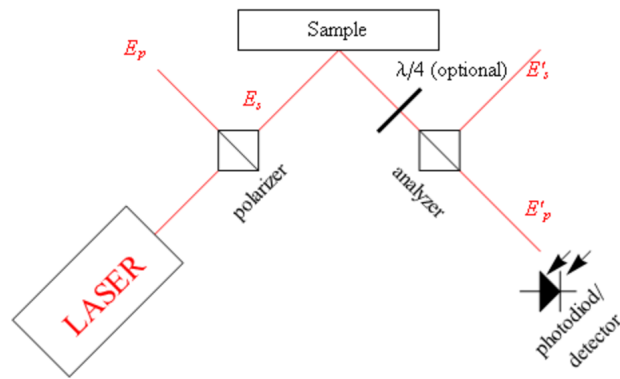
Μπορούμε να μοντελοποιήσουμε το φαινόμενο μέσα από τη σχέση[10]:

$$\beta = \mathcal{V}Bd \quad (1.2)$$

όπου β η γωνία στροφής του επιπέδου πόλωσης, \mathcal{V} η εμπειρική σταθερά *Verdet* η οποία χαρακτηρίζει το υλικό μας, B το μαγνητικό πεδίο και d η απόσταση που διανύει η ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία μέσα στο υλικό (εικ. 1.1).

1.3.1 Οπτικός Απομονωτής

Μια εφαρμογή του φαινομένου *Faraday* μπορούμε να βρούμε στην οπτική και στον τρόπο που δουλεύει ένας οπτικός απομονωτής (**Optical Isolator**). Ένας οπτικός απομονωτής χρησιμοποιείται ώστε να επιτρέπεται η διάδοση ακτινοβολίας μόνο σε μία κατεύθυνση. Στην εικόνα 1.1 βλέπουμε έναν πολωτή, στη συνέχεια το μαγνητό-οπτικό μας υλικό και τέλος έναν αναλυτή. Αν η ακτινοβολία έχει διεύθυνση διάδοσης από τα αριστερά στα δεξιά θα πολωθεί κάθετα από τον πολωτή, στη συνέχεια το μαγνητό-οπτικό υλικό θα στρέψει το επίπεδο πόλωσης κατά 45° . Ο αναλυτής που είναι στραμμένος κατά 45° θα επιτρέψει στην ακτινοβολία να περάσει. Αν όμως η ακτινοβολία έχει διεύθυνση διάδοσης



Σχήμα 1.2: Ένα υλικό με ανομοιογενή μαγνήτιση θα προκαλέσει διαφορετική στροφή *Kerr* σε διαφορετικά σημεία του υλικού. Στην διάταξη αυτή μπορούμε να μετρήσουμε την ένταση της ανακλώμενης ακτινοβολίας που τελικά οδηγεί στην περιγραφή της μαγνήτισης του υλικού.

από τα δεξιά στα αριστερά, μετά την πόλωση απο τον αναλυτή το μαγνητό-οπτικό υλικό θα το στρέψει την ακτινοβολία αριστερόστροφα κατά 45° . Έτσι η ακτινοβολία θα έχει οριζόντια πόλωση και ως εκ τούτου δεν θα περάσει απο τον αναλυτή[16].

Οι οπτικοί απομονωτές χρησιμοποιούνται στην αποτροπή ανεπιθύμητης ακτινοβολίας σε οπτικούς ταλαντωτές όπως κοιλότητες *laser*. Επίσης χρησιμοποιούνται ως στοιχεία σε οπτικά κυκλώματα.

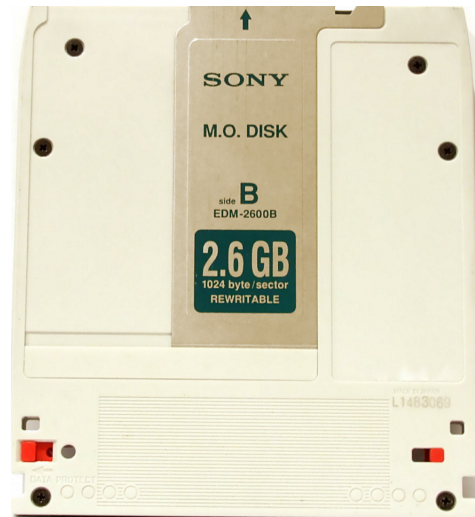
1.3.2 Μικροσκόπιο *Kerr*

Ένα μικροσκόπιο *Kerr* χρησιμοποιεί το μαγνητό-οπτικό φαινόμενο *Kerr* (Magneto-Optical Kerr Effect-*MOKE*), για να αποτυπώσει διαφορές στην μαγνήτιση ενός μαγνητικού υλικού. Το μικροσκόπιο *Kerr* χρησιμοποιεί και πάλι τη γεωμετρία πολωτής-μαγνητικό υλικό-αναλυτής. Λόγω της αλλαγής πόλωσης από το δείγμα, έχουμε διαφορετική γωνία μεταξύ του επιπέδου πόλωσης της ακτινοβολίας και του αναλυτή. Έτσι απο τον νόμο του *Malus*, έχουμε διαφορά στην ένταση της ακτινοβολίας που περνάει από τον αναλυτή. Με αυτό τον τρόπο βρίσκουμε τη γωνία στροφής του επιπέδου πόλωσης και άρα την μαγνήτιση του υλικού, αφού όπως είπαμε η γωνία στροφής είναι ανάλογη του μαγνητικού πεδίου.

1.3.3 Μαγνητό-Οπτικός Δίσκος

Ο μαγνητό-οπτικός δίσκος, αποτελεί υποκατηγορία των οπτικών δίσκων. Δηλαδή ένα *laser*, (η ακτινοβολία του οποίου βρίσκεται μέσα ή κοντά στην οπτική ακτινοβολία) χρησιμοποιείται για να γράψουμε και να διαβάσουμε δεδομένα από τον οπτικό δίσκο. Σε ένα κοινό οπτικό δίσκο, όπως *CD - R* ή *DVD - R*, το υλικό είναι χαραγμένο. Το ύψος των χαραγμάτων είναι κοντά στο $\frac{1}{4}$ της ακτινοβολίας του *laser* ώστε να προκαλείται καταστροφική συμβολή (ψηφιακό 0).

Σε αντίθεση με τον κοινό οπτικό δίσκο ένας μαγνητό-οπτικός δίσκος αποτελείται από ένα μαγνητικό υλικό. Κατά την εγγραφή δεδομένων μια μαγνητική κεφαλή έρχεται σε επαφή με τον δίσκο από την αντίθετη πλευρά που βρίσκεται



Σχήμα 1.3: Ένας από τους πρώτους μαγνητό-οπτικούς δίσκους της εταιρίας *Sony*.

το *laser*. Το *laser* θερμαίνει το σημείο της εγγραφής (το φέρνει σε θερμοκρασία *Curie*) και η μεταλλική κεφαλή αλλάζει τοπικά την μαγνήτιση του δίσκου. Τώρα κατά την ανάγνωση, το *laser* ακτινοβολεί τον δίσκο, ανάλογα με την μαγνητική κατάσταση του σημείου της επιφάνειας το ανακλώμενο φως παρουσιάζει στροφή στο επίπεδο πόλωσης (φαινόμενο *Kerr*). Χρησιμοποιώντας ένα αναλυτή και ένα φωτόανιχνευτή μετράμε την ένταση της ανακλώμενης ακτινοβολίας η οποία θα αντιστοιχεί στο ψηφιακό 0 (μηδενική ένταση) ή 1(ένταση πάνω απο ένα όριο).

Κεφάλαιο 2

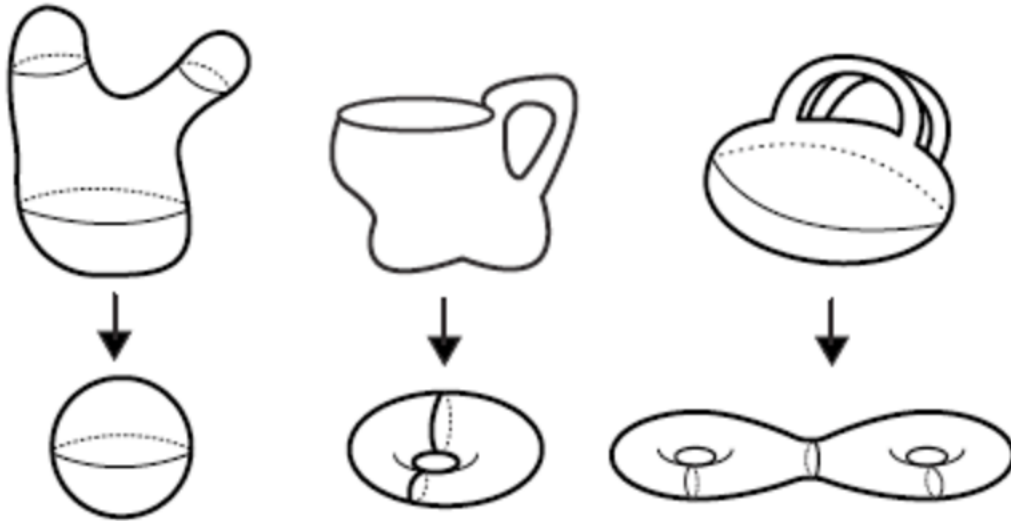
Τοπολογική Ύλη

Σε αυτή την ενότητα θα γίνει μια συνοπτική παρουσίαση των τοπολογικών υλικών, τα υλικά που μελετάμε τις οπτικές τους ιδιότητες. Θα δούμε τα βασικά θεωρητικά τους θεμέλια, εστιάζοντας στους τοπολογικούς μονωτές (Topological Insulators - TI) και στα ημιμέταλλα Weyl (Topological Weyl Semimetal - TWS).

Τα τοπολογικά υλικά είναι εκπληκτικά υλικά όχι μόνο για τις εντυπωσιακές ιδιότητες που κατέχουν αλλά και για το ότι άνοιξαν τον δρόμο σε μια καινούργια κατηγοριοποίηση υλικών, αυτήν της τοπολογικής τάξης [18]. Ένα από τα μεγαλύτερα επιτεύγματα της φυσικής συμπυκνωμένης ύλης τον περασμένο αιώνα ήταν η κατηγοριοποίηση των χβαντικών καταστάσεων βάσει της αρχής του αυθόρμητου σπάσιμου συμμετρίας (spontaneous symmetry breaking (SSB)). Για παράδειγμα όταν έχουμε τη μετάβαση από την υγρή στην χρυσταλλική φάση έχουμε σπάσιμο της συμμετρίας μετατόπισης, παρόλο που οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ατόμων είναι συμμετρικές ως προς τις μετατοπίσεις. Ένας μαγνήτης σπάει τη συμμετρία στροφής παρόλο που οι στοιχειώδεις αλληλεπιδράσεις είναι περιστροφικά συμμετρικές, ενώ ένας υπεραγωγός σπάει αυθόρμητα την συμμετρία βαθμίδας. Η συμπεριφορά αυτή περιγράφεται από μια παράμετρο τάξη που παίρνει μη-μηδενικές τιμές μόνο όταν βρισκόμαστε στην κατάσταση τάξης. Ενώ μπορεί να περιγραφεί από μια ενεργό θεωρία την λεγόμενη θεωρία Ginzburg-Landau και λέμε ότι αυτές οι χβαντικές καταστάσεις ακολουθούν το “Παράδειγμα του Landau” [21].

Πριν 30 χρόνια όμως βρέθηκε μια καινούργια χβαντική κατάσταση που δεν ακολουθεί το παράδειγμα του Landau. Κατά το χβαντικό φαινόμενο Hall (Quantum Hall Effect-QHE) δεν σπάει καμία συμμετρία αλλά ορίζεται μια τοπολογική φάση με την έννοια ότι συγκεκριμένες ποσότητες (στην συγκεκριμένη περίπτωση η αγωγιμότητα Hall $\sigma_{xy} = e^2/h$) δεν επηρεάζονται από ομαλές αλλαγές των παραμέτρων του υλικού, αλλάζουν μόνο όταν έχουμε μια χβαντική μετάβαση φάσης.

Τα τελευταία 10 χρόνια ένα καινούργιος κλάδος έκανε την εμφάνιση του στη φυσική συμπυκνωμένης ύλης, μετά την διαπίστωση ότι οι αλληλεπιδράσεις σπίν-τροχιακού μπορούν να οδηγήσουν σε τοπολογικά μονωτικές ηλεκτρονικές φάσεις [5]. Ένας τοπολογικός μονωτής συμπεριφέρεται ακριβώς όπως έναν συνθιμισμένο μονωτή στο εσωτερικό του (ένα ενεργειακό χάσμα διαχωρίζει την υψηλότερα κατειλημμένη ζώνη από την χαμηλότερα κενή ζώνη). Παρόλα αυτά, στην επιφάνεια του τοπολογικού μονωτή έχουμε αγωγίμες καταστάσεις που προστατεύονται από τη συμμετρία αντιστροφής χρόνου. Όπως θα δούμε στη συνέχεια, οι τοπολογικοί μονωτές συνδέονται στενά με το ακέραιο χβαντικό φαινόμενο Hall (Integer Quantum Hall State-IQHS) στις δύο διαστάσεις, όπου και πάλι έχουμε ιδιαίτερες επιφανειακές καταστάσεις.



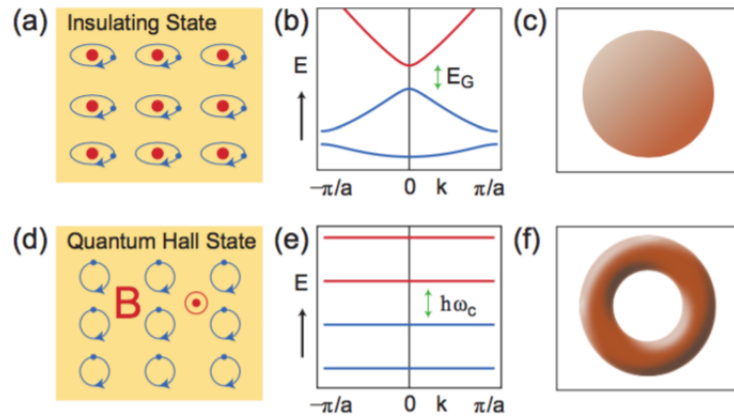
Σχήμα 2.1: Τα τρία πάνω σχήματα είναι τοπολογικά ισοδύναμα με το αντίστοιχο κάτω, αφού μπορούν να παραμορφωθούν ομαλά στα κάτω σχήματα. (από [15])

Για να αναπτύξουμε την θεωρία αυτού του ταχέως αναπτυσσόμενου πεδίου, θα δώσουμε μια εισαγωγή στην Τοπολογική Θεωρία Ζωνών και θα εξηγήσουμε την τοπολογική τάξη στο QHE και στους τοπολογικούς μονωτές. Επίσης σημαντικό θεώρημα στην κατανόηση των τοπολογικών καταστάσεων της ύλης είναι η “αντιστοιχία εσωτερικού-συνόρου” (**bulk-boundary correspondence**) και θα αναφέρουμε τα κύρια σημεία. Ενώ θα τελειώσουμε με την περιγραφή του 2D τοπολογικού μονωτή και του ημιμετάλλου Weyl.

2.1 Τοπολογική Θεωρία Ζωνών

Η κβαντική κατάσταση Hall αποτέλεσε το πρώτο παράδειγμα μιας κβαντικής κατάστασης η οποία ήταν τοπολογικά ξεχωριστή από όλες τις άλλες καταστάσεις της ύλης [11]. Η ακριβής κβάντωση της αγωγιμότητας Hall εξηγείται από το ότι είναι μια τοπολογικά αναλλοίωτη ποσότητα, η οποία μπορεί να πάρει σαν τιμές μόνο ακέραια πολλαπλάσια του e^2/h . Οι μαθηματικοί χρησιμοποιούν την έννοια του τοπολογικά αναλλοίωτου για να κατηγοριοποιήσουν διαφορετικά γεωμετρικά σχήματα σε διάφορες κλάσεις. Οι διδιάστατες επιφάνειες μπορούν να κατηγοριοποιηθούν ανάλογα με το γένος (τρύπες) που έχουν. Δύο σχήματα δηλαδή είναι τοπολογικά ισοδύναμα αν μπορούμε να παραμορφώσουμε το ένα στο άλλο χωρίς να δημιουργήσουμε τρύπες (Εικ. 2.1).

Πώς μεταφέρεται όμως αυτή η έννοια στη φυσική; Η κεντρική ιδέα είναι αυτή της “ομαλής παραμόρφωσης”. Η πράξη της ομαλής παραμόρφωσης ομαδοποιεί τα σχήματα σε κλάσεις ισοδυναμίας. Στη φυσική μπορεί κάποιος να σκεφτεί γενικές Χαμιλτονιανές σε συστήματα πολλών σωμάτων με ένα ενεργειακό χάσμα να διαχωρίζει τις κατειλημμένες από τις κενές καταστάσεις (όπως σε ένα μονωτή). Τώρα μπορούμε να ορίσουμε μια ομαλή παραμόρφωση σαν μια παραμόρφωση που δεν κλείνει το ενεργειακό χάσμα. Έτσι σε αυτή την κλάση ισοδυναμίας θα ανήκουν όλοι οι μονωτές και οι ημιαγωγοί. Ως εκπρόσωπο της



Σχήμα 2.2: (a,b,c) η μονωτική κατάσταση (d,e,f) IQHS
 (a) ένας ατομικός μονωτής (b) η σχέση διασποράς για έναν
 μονωτή (c) κλάση ισοδυναμίας σφαίρας $g = 0$
 (d) κυκλοτρονική κίνηση των e^- (e) τα επίπεδα Landau
 (f) κλάση ισοδυναμίας τόρου $g = 1$ (από [13])

κλάσης θεωρούμε το “κενό” που όπως ξέρουμε από την σχετικιστική θεωρία του Dirac, η ενέργεια του κενού βρίσκεται σε ένα ενεργειακό χάσμα και διαχωρίζει τα σωματίδια από τα αντισωματίδια. Ένα ενδιαφέρον ερώτημα που μπορούμε να ρωτήσουμε λοιπόν είναι αν υπάρχουν άλλες κλάσεις ισοδυναμίας.

2.1.1 Κβαντική Κατάσταση Hall

Η απάντηση είναι καταφατική και τα παραδείγματα είναι πραγματικά εντυπωσιακά. Το πιο απλό εκ των οποίων είναι το ακέραιο κβαντικό φαινόμενο Hall (IQHE), το οποίο προκύπτει όταν ηλεκτρόνια περιορισμένα στις 2Δ τοποθετούνται σε ισχυρό μαγνητικό πεδίο.

Κλασικά τα ηλεκτρόνια θα ακολουθήσουν κυκλικές τροχιές μέσα στο 2Δ υλικό λόγω του μαγνητικού πεδίου. Αν αντιμετωπίσουμε το σύστημα κβαντομηχανικά οι τροχιές αυτές κβαντίζονται. Τα ενεργειακά επίπεδα των κβαντισμένων τροχιών (επίπεδα Landau) παίρνουν διακριτές τιμές:

$$E_n = \hbar\omega_c(n + 1/2) \quad (2.1)$$

όπου $\omega_c = eB/m$ η κυκλοτρονική συχνότητα. Αν N επίπεδα είναι κατειλημμένα τότε ένα ενεργειακό χάσμα διαχωρίζει τα κενά από τα κατειλημμένα επίπεδα, όπως σε ένα μονωτή. Σε αντίθεση με ένα μονωτή όμως, όταν εφαρμόσουμε ένα ηλεκτρικό πεδίο οι τροχιές ολισθαίνουν και έχουμε την εμφάνιση ρεύματος στο 2Δ υλικό, το υλικό χαρακτηρίζεται από την από την κβαντισμένη αγωγιμότητα Hall:

$$\sigma_{xy} = N \frac{e^2}{h}. \quad (2.2)$$

Η χβάντωση του σ_{xy} έχει μετρηθεί με ακρίβεια 9 σημαντικών ψηφίων. Η τρωμερή ακρίβεια είναι συνέπεια του τοπολογικού χαρακτήρα της αγωγιμότητας Hall.

Για τα επίπεδα Landau μπορούμε να ορίσουμε μια δομή ζωνών. Ο τρόπος που γίνεται αυτό είναι να ορίσουμε μια στοιχειώδη κυψελίδα με επιφάνεια $A = 2\pi\hbar c/eB$. Έτσι οι γεννήτορες των μετατοπίσεων μετατίθενται, όποτε το θεώρημα του Bloch μας επιτρέπει να ονοματίσουμε τις καταστάσεις βάσει του κυματαριθμού τους \vec{k} . Εξασφαλίζοντας ότι το δυναμικό έχει την ίδια περιοδικότητα με την στοιχειώδη κυψελίδα που ορίσαμε, βρίσκουμε ότι τα ενεργειακά επίπεδα θα διασπείρονται σαν συνάρτηση του \vec{k} . Αυτό οδηγεί σε μια δομή ζωνών ταυτόσημη με αυτήν ενός μονωτή. Οπότε πως προκύπτει η διαφορά μεταξύ ενός μονωτή και ενός υλικού στο οποίο έχουμε ροή ρεύματος που περιγράφεται από την χβαντισμένη αγωγιμότητα Hall 2.2;

Η απάντηση δόθηκε στη δημοσίευση των Thouless, Kohmoto, Nightingale και den Nijs (TKNN) [18] και έχει να κάνει με την τοπολογία. Μια 2Δ σχέση διασποράς αποτελείται από ένα χάρτη από την χρυσταλλική ορμή \vec{k} που ορίζεται σε ένα τόρο (περιοδικές συνοριακές συνθήκες) σε μια Χαμιλτονιανή Bloch $\mathcal{H}(\vec{k})$. Όπως είπαμε μπορούμε να ορίσουμε τοπολογικές κλάσεις ισοδυναμίας, θεωρώντας σαν ισοδύναμες τις $\mathcal{H}(\vec{k})$ οι οποίες μπορούν να παραμορφωθούν με συνεχή τρόπο χωρίς να κλείνουν το ενεργειακό χάσμα. Αυτές οι κλάσεις χαρακτηρίζονται από έναν αμέριστο αριθμό n που καλείται "αναλλοίωτο Chern" (Chern invariant). Για να καταλάβουμε διαισθητικά το αναλλοίωτο Chern θα δούμε πως ορίζεται μέσα από την φάση Berry (Berry Phase), που σχετίζεται με την συνάρτηση Bloch $|u_m(\vec{k})\rangle$. Όταν το \vec{k} διατρέχει έναν κλειστό βρόγχο η $|u_m(\vec{k})\rangle$ παίρνει μια καλά καθορισμένη φάση Berry που δίνεται από την σχέση:

$$\phi_B = \oint i\langle u_m(\vec{k}) | \nabla_{\vec{k}} | u_m(\vec{k}) \rangle dk \quad (2.3)$$

Από το θεώρημα του Stokes μπορούμε να εκφράσουμε την φάση Berry σαν επιφανειακό ολοκλήρωμα της καμπυλότητας Berry:

$$F_m = \vec{\nabla} \times [i\langle u_m(\vec{k}) | \nabla_{\vec{k}} | u_m(\vec{k}) \rangle] \quad (2.4)$$

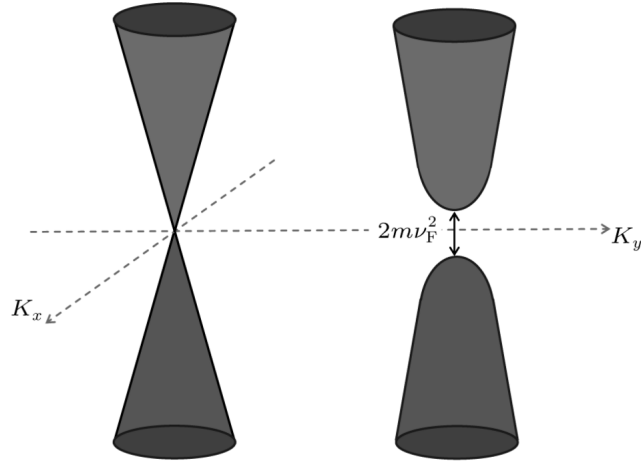
Οπότε

$$\phi_B = \int_S F_m d^2k \quad (2.5)$$

Το αναλλοίωτο Chern είναι η ολική ροή της καμπυλότητας Berry F_m στην ζώνη Brillouin αθροιζόμενο πάνω σε όλες τις κατειλημμένες ζώνες

$$n = \sum_{m=1}^N n_m = \sum_{m=1}^N \frac{1}{2\pi} \int_{B.Z} F_m d^2k \quad (2.6)$$

όπου κάθε n_m είναι ένας χβαντισμένος αμέριστος. Οι TKNN έδειξαν ότι το N στην 2.2 είναι το ίδιο με το n στην 2.6. Το οποίο καταδεικνύει τον τοπολογικό χαρακτήρα της αγωγιμότητας Hall.



Σχήμα 2.3: Η σχέση διασποράς για το γραφένιο κοντά σε ένα από τα σημεία Dirac. Αριστερά χωρίς και δεξιά με ενεργειακό χάσμα (από [12]).

2.1.2 Το μοντέλο του Haldane

Ένα απλό παράδειγμα του χβαντικού φαινομένου Hall σε μια θεωρία ζωνών παρέχει το μοντέλο του γραφενίου σε ένα περιοδικό μαγνητικό πεδίο το οποίο εισήγαγε ο Haldane [9]. Εστιάζουμε σε αυτό το παράδειγμα γιατί παρέχει τις βασικές ιδέες πίσω από τον “2Δ σπίν-χβαντικό Hall μονωτή”. Επίσης το μοντέλο Haldane χρησιμοποιείται σαν βάση για την μοντελοποίηση τοπολογικών μονωτών και τοπολογικών ημιμετάλλων Weyl που αποτελούν την θεωρητική θεμελίωση αυτής της διπλωματικής.

Το γραφένιο οφείλει τις εντυπωσιακές ηλεκτρονικές του ιδιότητες στο γεγονός ότι η ζώνη αγωγιμότητας και η ζώνη σθένους ακουμπάνε η μια την άλλη σε δύο διαφορετικά σημεία στη ζώνη Brillouin, τα λεγόμενα σημεία Dirac.

Το πιο απλό μοντέλο του γραφενίου χρησιμοποιεί δύο μοντέλα ζωνών για τα p_z τροχιακά για τα δύο ισοδύναμα άτομα στην μοναδιαία κυψελίδα του γραφενίου. Η χαμιλτονιανή Bloch είναι ένας 2×2 πίνακας και δίνεται από το εσωτερικό γινόμενο,

$$\mathcal{H}(\vec{k}) = \vec{h}(\vec{k}) \cdot \vec{\sigma} \quad (2.7)$$

όπου $\vec{h}(\vec{k}) = (h_x(\vec{k}), h_y(\vec{k}), 0)$ και $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ οι πίνακες Pauli. Ο λόγος που $h_z(\vec{k}) = 0$ είναι ότι ο συνδιασμός της ισοτιμίας (\mathcal{P}) και της συμμετρίας χρόνου (\mathcal{T}) πρέπει να αφήνουν την χαμιλτονιανή αναλλοίωτη, οπότε

$$h_z(\vec{k}) = \mathcal{T}\mathcal{P}h_z(\vec{k}) = \mathcal{T}[-h_z(-\vec{k})] = -h_z(\vec{k}) \quad (2.8)$$

και άρα $h_z = 0$. Στο γραφένιο έχουμε δύο σημεία Dirac στα σημεία \vec{K} και $-\vec{K}$. Όταν ο κυματριθμός βρίσκεται κοντά στην περιοχή του K, $k = K + q$ όπου q μικρό, έχουμε ότι $h(\vec{q}) = \hbar v_F \vec{q}$, όπου v_F η ταχύτητα Fermi, έτσι η

$$\mathcal{H}(\vec{q}) = \hbar v_F \vec{q} \cdot \vec{\sigma} \quad (2.9)$$

έχει την μορφή μιας 2Δ χαμιλτονιανής Dirac (εικ. 2.3, αριστερά). Ο εκφυλισμός στα σημεία Dirac προστατεύεται από τις συμμετρίες \mathcal{P} και \mathcal{T} και για να τον άρουμε πρέπει να τις σπάσουμε. Αν σπάσουμε την \mathcal{P} τότε επιτρέπουμε να έχουμε $h_z(\vec{k}) \neq 0$. Αν η $h_z(\vec{k})$ είναι μικρή, τότε κοντά στο K η χαμιλτονιανή μας αποκτά μάζα

$$\mathcal{H}(\vec{q}) = \hbar v_F \vec{q} \cdot \vec{\sigma} + \sigma_z m, \quad (2.10)$$

όπου $m = h_z(\vec{K})$ και άρα η σχέση διασποράς γίνεται $E(\vec{q}) = \pm \sqrt{|\hbar v_F \vec{q}|^2 + m^2}$ (εικ. 2.3, δεξιά). Σημειώνουμε ότι η συμμετρία \mathcal{T} (που δεν έχει σπάσει) μας υποχρεώνει να έχουμε την ίδια μάζα στο διαμετρικό σημείο K'

$$h_z(K') = m' = m, \quad (2.11)$$

η κατάσταση αυτή χαρακτηρίζει ένα συνηθισμένο μονωτή.

Ο Haldane [9] φαντάστηκε τι θα γινόταν αν σπάσουμε μόνο την συμμετρία \mathcal{T} . Αυτό μπορεί να γίνει μέσω ενός μαγνητικού πεδίου που έχει την συμμετρία του πλέγματος και έχει μέση τιμή μηδέν. Αυτή η διαταραχή δίνει μάζα στη Χαμιλτονιανή όπως και πριν. Παρόλα αυτά η συμμετρία \mathcal{P} υποχρεώνει τις $h_z(\vec{K})$ και $h_z(\vec{K}')$ να έχουν αντίθετο πρόσημο

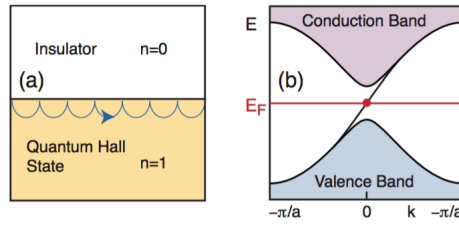
$$h_z(K') = m' = -m = h_z(K), \quad (2.12)$$

Ο Haldane έδειξε ότι αυτή η κατάσταση, παρόλο που παρουσιάζει ενεργειακό χάσμα, δεν είναι μονωτής αλλά μια κβαντική κατάσταση Hall με $\sigma_{xy} = e^2/h$.

Η μη-μηδενική αγωγιμότητα Hall μπορεί να γίνει κατανοητή στα πλαίσια του αναλλοίωτου Chern. Η 2.6 για την Χαμιλτονιανή 2.10 παίρνει την μορφή

$$n = \frac{1}{4\pi} \int d^2k (\partial_{k_x} \hat{h} \times \partial_{k_y} \hat{h}) \cdot \hat{h} \quad (2.13)$$

όπου $\hat{h} = \frac{\vec{h}(\vec{k})}{|\vec{h}(\vec{k})|}$ το μοναδιαίο διάνυσμα. Το n μετράει πόσες φορές το \hat{h} διατρέχει μια σφαίρα σαν συνάρτηση του \vec{k} (μας καθορίζει την τοπολογία της \hat{h}). Όταν $m = m' = 0$ η \hat{h} βρίσκεται στον ισημερινό της σφαίρας ($h_z = 0$) και για τα 2 σημεία Dirac έχουμε μια περιστροφή με αντίθετη φορά, οπότε το συνολικό αποτέλεσμα είναι μηδέν. Για μικρά m , η $h \neq 0$ παντού, η \hat{h} περνάει από τον βόρειο ή νότιο πόλο ανάλογα με το πρόσημο της μάζας. Προκύπτει ότι κάθε σημείο Dirac συμβάλει κατά $\pm e^2/2h$ στην σ_{xy} . Στην μονωτική κατάσταση $m = m'$ και οι συμβολές αλληλοαναιρούνται. Στην κβαντική κατάσταση Hall, $m = -m'$ και άρα $\sigma_{xy} = e^2/h$.



Σχήμα 2.4: Στη διεπιφάνεια ενός μονωτή και μιας χβαντικής κατάστασης Hall δημιουργούνται αγώγιμες καταστάσεις. (α) η χειρόμορφη φύση των καταστάσεων (β) Η ηλεκτρονική δομή στο μοντέλο Haldane. Η μοναδική οριακή κατάσταση συνδέει την ζώνη σθένους με την ζώνη αγωγιμότητας (από [13]).

2.1.3 Οριακές Καταστάσεις και η Αντιστοιχία Εσωτερικού-Συνόρου

Τι θα συμβεί στη διεπιφάνεια δύο υλικών με διαφορετική τοπολογία; Η απάντηση είναι εντυπωσιακή. Θα έχουμε την δημιουργία αγώγιμων χειρόμορφων καταστάσεων, εννοώντας ότι θα έχουμε ροή φορτίου μόνο κατά μια κατεύθυνση. Αυτές οι καταστάσεις, δεν επηρεάζονται από ατέλειες καθώς οι ατέλειες αποτελούν διαταραχές που δεν αλλάζουν την τοπολογία των υλικών.

Φανταζόμαστε την διεπιφάνεια ενός 2Δ κρυστάλλου όπου σταδιακά έχουμε την αλλαγή από την χβαντική κατάσταση Hall ($n = 1$) στην μονωτική κατάσταση ($n = 0$).

Μια απλή θεωρία για τις χειρόμορφες συνοριακές καταστάσεις προκύπτει από το μοντέλο δύο ζωνών του Dirac 2.10. Για να μοντελοποιήσουμε την αλλαγή στην τοπολογία, θεωρούμε ότι η m' έχει σταθερή τιμή ενώ η m αλλάζει σαν συνάρτηση του y , $m = m(y)$. Έτσι για $m(y > 0) > 0$ η μονωτική κατάσταση και $m(y < 0) < 0$ η χβαντική κατάσταση Hall. Λύνοντας την εξίσωση ενέργειας 2.10 βρίσκουμε την κομψή λύση

$$\psi_{q_x}(x, y) \propto e^{iq_x x} e^{-\int_0^y dy' \frac{m(y')}{v_F}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

με $E(q_x) = \hbar v_F q_x$. Αυτή η σχέση διασποράς τέμνει την ενέργεια Fermi E_F με θετική ταχύτητα ομάδας $\frac{dE}{dq_x} = \hbar v_F$ και ορίζει μια δεξιόστροφη συνοριακή κατάσταση.

Αλλάζοντας την Χαμιλτονιανή κοντά στην επιφάνεια αλλάζουν και οι σχέσεις διασποράς των αγώγιμων συνοριακών καταστάσεων. Για παράδειγμα μπορούμε να αλλάξουμε την $E(q_x)$ ώστε να τέμνει τρεις φορές την επιφάνεια Fermi (δύο φορές με θετική ταχύτητα ομάδας και μια με αρνητική). Η διαφορά $N_R - N_L$ μεταξύ των δεξιόστροφων και αριστερόστροφων καταστάσεων δεν αλλάζει και κατ' ακρίβεια καθορίζεται από την τοπολογία των δύο τοπολογικών καταστάσεων. Συγκεκριμένα

$$N_R - N_L = \Delta n \quad (2.15)$$

όπου Δn η διαφορά των αριθμών Chern στην διεπαφή. Η σχέση 2.15 ονομάζεται Αντιστοιχία Εσωτερικού-Συνόρου (Bulk-Edge Correspondence)

καθώς συνδέει την αγωγήμη χειρόμορφη συνοριακή κατάσταση με την τοπολογία των εσωτερικών καταστάσεων.

2.2 Τοπολογικός Μονωτής Z_2

Όπως είδαμε για να καταλήξουμε σε μια μη τετριμμένη τοπολογική κατάσταση θα πρέπει να σπάσουμε την συμμετρία αντιστροφής χρόνου (\mathcal{T}). Παρόλα αυτά αν θεωρήσουμε σωματίδια με σπίν, η αλληλεπίδραση σπίν-τροχιακού οδηγεί την τοπολογική κατάσταση σε μια διαφορετική κλάση μονωτικής δομής ζωνών [5]. Για να καταλάβουμε πως προκύπτει αυτή η διαφορετική κλάση πρέπει να εξετάσουμε το ρόλο της συμμετρίας \mathcal{T} σε σωματίδια με σπίν 1/2.

Η συμμετρία \mathcal{T} μπορεί να εκπροσωπηθεί από τον τελεστή:

$$\mathcal{T} = e^{i\pi S_y/\hbar} K \quad (2.16)$$

όπου K ο τελεστής μιγαδικής συζυγίας. Για σωματίδια με σπίν 1/2 ο τελεστής \mathcal{T} έχει την ιδιότητα $\mathcal{T}^2 = -1$. Η ιδιότητα αυτή οδηγεί σε ένα ενδιαφέρον περιορισμό γνωστό ως θεώρημα **Kramers**. Αν θεωρήσουμε μια Χαμιλτονιανή αναλλοίωτη ως προς την αντιστροφή του χρόνου, ενός σωματιδίου με σπίν 1/2. Οι ιδιόκαταστάσεις $|\psi\rangle$ και $\mathcal{T}|\psi\rangle$ θα έχουν την ίδια ενέργεια. Το θεώρημα εκφυλισμού του **Kramers** μας λέει ότι αυτές οι δύο καταστάσεις είναι διαφορετικές οπότε έχουμε διπλό εκφυλισμό. Πράγματι, έστω ότι είναι ίδιες καταστάσεις τότε $\mathcal{T}|\psi\rangle = e^{i\phi}|\psi\rangle$, οπότε

$$-|\psi\rangle = \mathcal{T}^2|\psi\rangle = \mathcal{T}e^{i\phi}|\psi\rangle = e^{i\pi S_y/\hbar} K e^{i\phi}|\psi\rangle = e^{-i\phi}\mathcal{T}|\psi\rangle = |\psi\rangle \quad (2.17)$$

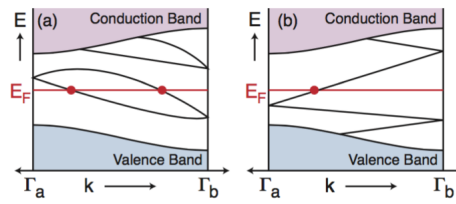
άτοπο, αφού $|\psi\rangle \neq 0$. Στη παρουσία αλληλεπιδράσεων σπίν-τροχιακού ο εκφυλισμός **Kramers** έχει σημαντικές συνέπειες.

Μια \mathcal{T} αναλλοίωτη Χαμιλτονιανή *Bloch* πρέπει να ικανοποιεί την σχέση

$$\mathcal{T}\mathcal{H}(k)\mathcal{T}^{-1} = \mathcal{H}(-k) \quad (2.18)$$

Τώρα θέλουμε να κατηγοριοποιήσουμε μόνο τις Χαμιλτονιανές που ικανοποιούν την 2.18 ώστε ισοδύναμες να θεωρούνται οι Χαμιλτονιανές που μπορούν να παραμορφωθούν ομαλά χωρίς να κλείνουν το ενεργειακό χάσμα. Το αναλλοίωτο **Chern** είναι $n = 0$ (δείξαμε πριν ότι η συμμετρία \mathcal{T} συνεπάγεται $m = m'$ και άρα $n = 0$). Παρόλα αυτά υπάρχει ακόμα μια αναλλοίωτη ποσότητα ν , η οποία μπορεί να πάρει τις τιμές $\nu = 0, 1$ [5]. Για να καταλάβουμε πως προκύπτουν αυτές οι δύο κλάσεις πρέπει να στρέψουμε την προσοχή μας στην Αντιστοιχία Εσωτερικού-Συνόρου.

Στην εικόνα 2.5 φαίνονται οι συνοριακές καταστάσεις ενός \mathcal{T} αναλλοίωτου 2Δ μονωτή. Για τα σημεία $\Gamma_a = 0$ και $\Gamma_b = \pi/a$ έχουμε ότι $k = -k$, οπότε από το θεώρημα **Kramers** θα έχουμε δύο διαφορετικές καταστάσεις σε αυτά τα σημεία. Μακριά από αυτά τα σημεία η αλληλεπίδραση σπίν-τροχιακού αίρει τον εκφυλισμό. Τώρα υπάρχουν δύο τρόποι για να συνδέσουμε τα σημεία Γ_a και Γ_b . Στην εικ. 2.5(α) συνδέονται ανά ζεύγη. Σε αυτή την περίπτωση παρατηρούμε ότι η E_F τέμνεται ζυγό αριθμό φορών. Αυτή η κατάσταση είναι τοπολογικά



Σχήμα 2.5: Σχέσεις διασποράς μεταξύ δύο συνοριακών εκφυλισμένων σημείων *Kramer* $\Gamma_a = 0$ και $\Gamma_b = \pi/a$. (α) ζυγός αριθμός σημείων που τέμνεται η E_F (β) περιττός αριθμός σημείων που οδηγεί σε τοπολογικά προστατευμένες μεταλλικές συνοριακές καταστάσεις (από [13]).

ισοδύναμη με την μονωτική κατάσταση (κατάσταση κενού). Αντίθετα στην εικ. 2.5(β) οι συνοριακές καταστάσεις δεν μπορούν να παραμορφωθούν ομαλά στην κατάσταση του κενού και παρατηρούμε ότι τέμνουν την E_F περιττό αριθμό φορές. Σημειώνουμε ότι και στις δύο περιπτώσεις η κατάσταση k έχει την ίδια ενέργεια με την κατάσταση $-k$.

Το ποιά από αυτές τις δύο περιπτώσεις θα προκύψει έχει να κάνει με την τοπολογική κλάση του υλικού. Λόγω του εκφυλισμού αν η συνοριακή κατάσταση τέμνει την E_F στο k_x θα την τέμνει και στο $-k_x$. Αν συμβολίσουμε N_K αυτά τα ζεύγη, τότε η Αντιστοιχία Εσωτερικού-Συνόρου συνδέει το N_K με την διαφορά των \mathbb{Z}_2 αναλλοίωτων των δύο υλικών.

$$N_K = \Delta\nu \text{ mod } 2 \quad (2.19)$$

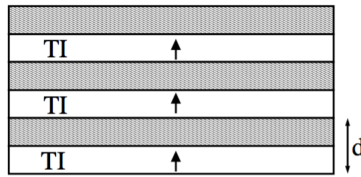
2.3 Τοπολογικά Ημιμέταλλα *Weyl*

Όπως είδαμε οι τοπολογικοί μονωτές παρουσιάζουν ενεργειακό χάσμα μεταξύ ζώνης σθένους και ζώνης αγωγιμότητας στο εσωτερικό τους. Παρόλα αυτά υπάρχουν αγωγίμες επιφανειακές καταστάσεις οι οποίες προστατεύονται από την τοπολογία. Τα τελευταία χρόνια οι ερευνητές έδειξαν πως αυτή η αντιστοιχία εσωτερικού-συνόρου μπορεί να συμβεί και όταν δεν υπάρχει ενεργειακό χάσμα, συγκεκριμένα όταν η ζώνη αγωγιμότητας και η ζώνη σθένους ακουμπάνε σε ένα μη-εκφυλισμένο σημείο [20]. Για να είναι τοπολογικά μη τετριμμένη αυτή η τυχαία επαφή μεταξύ ζώνης σθένους και αγωγιμότητας, θα πρέπει η συμμετρία αντιστροφής χρόνου (\mathcal{T}) ή η συμμετρία αντιστροφής χώρου (\mathcal{P}) να έχουν σπάσει [4].

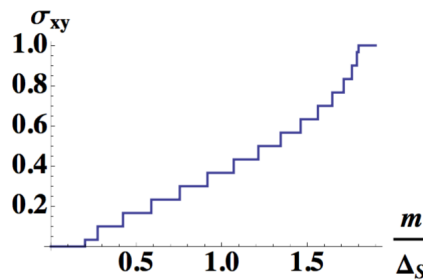
Η δομή ζωνών ενός *TWS* (Τοπολογικό Ημιμέταλλο *Weyl* - *Topological Weyl Semimetal*) κοντά στο σημείο επαφής μπορεί να περιγραφεί από την Χαμιλτονιανή

$$\mathcal{H} = \pm \hbar v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{k}. \quad (2.20)$$

Η Χαμιλτονιανή αυτή είναι ταυτόσημη με αυτήν της εξίσωσης *Weyl* στη φυσική στοιχειωδών σωματιδίων, που περιγράφει χειρόμορφα φερμιόνια δύο στοιχείων. Το πρόσημο μπροστά στη Χαμιλτονιανή χαρακτηρίζει τις δύο διαφορετικές χειρομορφίες που μπορεί να παρουσιάσει το φερμιόνιο *Weyl*. Οποιαδήποτε



Σχήμα 2.6: Προτεινόμενη διάταξη ημιμετάλλου *Weyl*. Τα σκιασμένα επίπεδα είναι συνηθισμένοι μονωτές ενώ το άσπρα είναι τοπολογικοί μονωτές. Τα βέλη δείχνουν την κατεύθυνση μαγνήτισης (από [2]).



Σχήμα 2.7: Τα m, Δ_s είναι παράμετροι της Χαμιλτονιανής και η αγωγιμότητα μετρείται σε μονάδες $\frac{e^2}{h}$. Όταν $\frac{m}{\Delta_s} < 0.2$ τότε $\sigma_{xy} = 0$ και το υλικό βρίσκεται στην μονωτική κατάσταση. Όταν $\frac{m}{\Delta_s} < 1.8$ τότε $\sigma_{xy} = 1$ το υλικό βρίσκεται στην ανώμαλη κατάσταση *Hall*. Η ενδιάμεση κατάσταση είναι αυτή του ημιμετάλλου *Weyl* (από [2]).

διαταραχή θα μετατοπίσει το σημείο επαφής αλλά δεν θα το διασπάσει. Αυτή η διαπίστωση έρχεται σε αντίθεση με την Χαμιλτονιανή της παραγράφου 2.1.2 που περιγράφει το γραφένιο. Στην περίπτωση του γραφενίου το σπάσιμο της \mathcal{T} ή της \mathcal{P} οδηγεί στη δημιουργία ενεργειακού χάσματος [2].

Η θεωρία μας λέει ότι τα σημεία επαφής πρέπει να εμφανίζονται σε ζεύγη αντίθετης χειρομορφίας και έτσι να αλληλοκαταστρέφονται. Όταν όμως σπάσουμε την συμμετρία \mathcal{T} ή την \mathcal{P} τα φερμιόνια *Weyl* διαχωρίζονται στον χώρο των ορμών και θεωρώντας ότι η συμμετρία μετατόπισης συνεχίζει να ισχύει τα σωματίδια είναι τοπολογικά σταθερά. Έχοντας σπάσει μια εκ των δύο συμμετριών, οι διαχωρισμένοι πλέον κόμβοι *Weyl* λειτουργούν σαν πηγή και καταβόθρα καμπυλότητας *Berry*.

Τα ημιμέταλλα *Weyl* εμφανίζονται σε ισχυρώς συσχετισμένα μαγνητικά υλικά όπως $Y_2Ir_2O_7$ [20]. Ενώ οι [2], έδειξαν ότι μπορούμε να τα μοντελοποιήσουμε μέσω μιας πολυεπίπεδης δομής που αποτελείται από φύλλα μονωτή και τοπολογικού μονωτή 2.6.

Είναι αξιοσημείωτο ότι τα *TWS* αποτελούν ένα είδος ενδιάμεσης κατάστασης μεταξύ της τοπολογικής κατάστασης ενός κοινού μονωτή και της ανώμαλης κβαντικής κατάστασης *Hall* (QAHE - Quantum Anomalous Hall Effect). Αυτή η ανώμαλη κατάσταση αποτελεί την έκφανση του φαινομένου *Hall* σε φερρομαγνητικά υλικά όπου και πάλι η αγωγιμότητα *Hall* έχει την κβαντισμένη τιμή $\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h}$ [6].

Με τον όρο ενδιάμεση κατάσταση εννοούμε ότι η αγωγιμότητα *Hall* εξαρτάται από την απόσταση των κόμβων *Weyl* στο χώρο των ορμών (θυμίζουμε ότι οι κώνοι διαχωρίζονται μετά το σπάσιμο της συμμετρίας αντιστροφής χρόνου). Αυτό δεν ισχύει στην μονωτική κατάσταση, όπου έχουμε ότι $\sigma_{xy} = 0$. Στην κβαντική ανώμαλη κατάσταση *Hall* έχουμε $\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h}$ (βλέπε εικ. 2.7). Συγκεκριμένα για $b = 0$ (μονωτική κατάσταση) εμφανίζεται ένα εκφυλισμένο σημείο *Dirac*. Στην συνέχεια καθώς το $b > 0$ το σημείο αυτό σπάει σε δύο μη-εκφυλισμένους κόμβους (φάση ημιμετάλλου *Weyl*) η απόσταση των κόμβων καθορίζει την αγωγιμότητα *Hall* σ_{xy} . Αυξάνοντας περαιτέρω την παράμετρο m οι δύο μη-εκφυλισμένοι κόμβοι συναντιούνται στο κέντρο της ζώνης *Brillouin* ($\vec{k} = 0$) όπου και αλληλοαναιρούνται, οδηγώντας το υλικό στην κβαντική ανώμαλη κατάσταση *Hall*.

Κεφάλαιο 3

Μοντελοποίηση Λεπτών Υμενίων Τοπολογικών Υλικών

Σε αυτή την ενότητα θα μελετήσουμε μοντέλα τοπολογικών υλικών σε γεωμετρία λεπτών υμενίων. Ο λόγος που εστιάζουμε σε υμένια έγκειται στο ότι τέτοιες γεωμετρίες είναι πιο πιθανό να χρησιμοποιηθούν σε εφαρμογές, όπως TFETs (Tunnel field-effect transistors) [17]. Επιπλέον η χρήση υμενίων μας οδηγεί σε έντονη εξάρτηση των ιδιοτήτων από το πάχος τους και έτσι ρυθμίζοντας το, μπορούμε να ενισχύσουμε τα οπτικά φαινόμενα που παρουσιάζουν τα τοπολογικά υλικά.

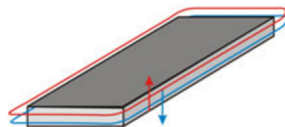
3.1 Το μοντέλο της Χαμιλτονιανής *Haldane*

Μπορούμε να προσομοιάσουμε ένα υμένιο από τοπολογικό μονωτή θεωρώντας δύο μεταλλικές επιφάνειες και στο ενδιάμεσο ένα διηλεκτρικό [19]. Οι μεταλλικές επιφάνειες θα μεταφέρουν ελικοειδή οιονεί-σωματίδια που θα χαρακτηρίζονται από την Χαμιλτονιανή *Haldane* [9]:

$$\mathcal{H} = (-1)^s \hbar v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{k} + \Delta \sigma_z \quad (3.1)$$

όπου $\vec{k} = (k_x, k_y, 0)$ και $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ οι πίνακες του *Pauli* που ενεργούν στους βαθμούς ελευθερίας του σπίν. Ο δείκτης $s = 0, 1$ αναφέρεται στην πάνω (1) και κάτω (0) επιφάνεια και έχει αντίθετο πρόσημο γιατί θέλουμε τα ρεύματα να έχουν αντίθετη φορά. Η επιρροή μιας διαταραχής που σπάει την συμμετρία \mathcal{T} μεταφράζεται στον όρο μάζας $\Delta \sigma_z$ ο οποίος ανοίγει ένα ενεργειακό χάσμα στο σημείο *Dirac*.

Θεωρούμε τώρα ένα ηλεκτρομαγνητικό πεδίο το οποίο προσπίπτει κάθετα στην τοπολογική μεταλλική επιφάνεια και επάγει ρεύματα στην πάνω και κάτω επιφάνεια του τοπολογικού μονωτή με επιφανειακή πυκνότητα:



Σχήμα 3.1: Μοντελοποίηση Τοπολογικού Μονωτή(από [8])

$$\vec{J} = \sigma \vec{E} \quad (3.2)$$

όπου σ ο τανυστής αγωγιμότητας. Η ηλεκτρική ανταπόκριση της επιφάνειας του τοπολογικού μονωτή μπορεί να βρεθεί χρησιμοποιώντας τη κβαντική κινηματική εξίσωση [19]:

$$\frac{\partial f_k^{(1)}}{\partial t} + e\vec{E} \cdot \frac{\partial f_k^{(0)}}{\partial \vec{k}} + i(v\vec{\tau} \cdot \vec{k} + \Delta\sigma_z) f_k^{(1)} = 0 \quad (3.3)$$

λύνοντας την μπορούμε να βρούμε την επιφανειακή πυκνότητα φορτίου

$$\vec{J} = eTr \sum_k e \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{k}} f_k^{(1)} \quad (3.4)$$

η 3.4, μας δίνει τον γυροσκοπικό τανύστη αγωγιμότητας

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{xx}^{\mathcal{R}} + i\sigma_{xx}^{\mathcal{I}} & -(\sigma_{xy}^{\mathcal{R}} + i\sigma_{xy}^{\mathcal{I}}) & 0 \\ \sigma_{xy}^{\mathcal{R}} + i\sigma_{xy}^{\mathcal{I}} & \sigma_{xx}^{\mathcal{R}} + i\sigma_{xx}^{\mathcal{I}} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{xx}^{\mathcal{R}} + i\sigma_{xx}^{\mathcal{I}} \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

όπου τα στοιχεία του δίνονται από τις σχέσεις [19]

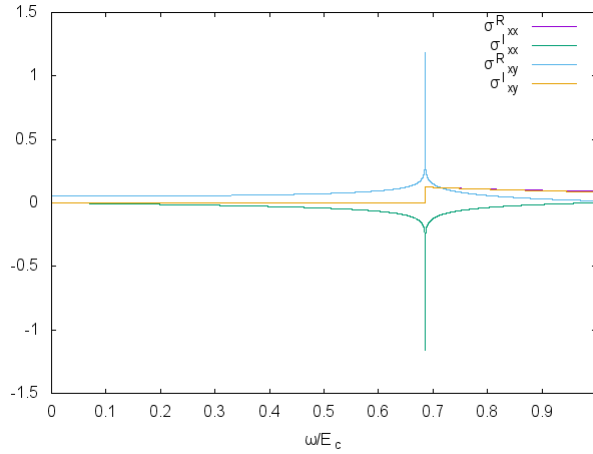
$$\begin{aligned} \sigma_{xx}^{\mathcal{R}} &= \frac{e^2}{\hbar} \left[\theta(|\mu_F| - |\Delta|) \frac{\delta(\omega)}{|4\mu_F|} (\mu_F^2 - \Delta^2) + \left(\frac{1}{16} + \frac{\Delta^2}{2\omega} \right) \theta(\omega - 2\max(|\mu_F|, |\Delta|)) \right], \\ \sigma_{xx}^{\mathcal{I}} &= \frac{e^2}{\hbar} \left[\theta(|\mu_F| - |\Delta|) \frac{\mu_F^2 - \Delta^2}{4\pi\omega\mu_F} - \frac{\Delta^2}{4\omega\pi} \left(\frac{1}{\epsilon_c} - \frac{1}{\max(|\mu_F|, |\Delta|)} \right) + \frac{1}{16\pi} \left(1 + 4\frac{\Delta^2}{\omega} \right) f(\omega) \right] \\ \sigma_{xy}^{\mathcal{I}} &= \frac{e^2}{\hbar} \left[\frac{\Delta}{4\omega} \theta(\omega - 2\max(|\mu_F|, |\Delta|)) \right], \\ \sigma_{xy}^{\mathcal{R}} &= \frac{e^2}{\hbar} \left[\frac{\Delta}{4\pi\omega} f(\omega) \right] \end{aligned} \quad (3.6)$$

όπου $\theta(x)$ η βηματική συνάρτηση, $\delta(x)$ η συνάρτηση *Dirac*, μ_F η ενέργεια Φέρμι (που μπορεί να προσαρμοστεί με προσμίξεις), ϵ_c η ενέργεια αποκοπής της Χαμιλτονιανής του *Dirac* και

$$f(\omega) = \ln \left| \frac{\omega + 2\epsilon_c}{\omega - 2\epsilon_c} \right| - \ln \left| \frac{\omega + 2\max(|\mu_F|, |\Delta|)}{\omega - 2\max(|\mu_F|, |\Delta|)} \right| \quad (3.7)$$

Στην ειχ. 3.2 φαίνεται η εξάρτηση των στοιχείων του τανυστή αγωγιμότητας (σε μονάδες e^2/\hbar) από την συχνότητα. Για μικρά ω παρατηρούμε ότι τα στοιχεία του τανυστή τείνουν στο 0, εκτός από την $\sigma_{xy}^{\mathcal{R}}$ η οποία όπως έδειξαν οι Wang-Kong Tse, A. H. MacDonald [19] τείνουν στην τιμή

$$\sigma_{xy}^{\mathcal{R}} = \frac{\alpha}{4\pi} \left(1 - \frac{\Delta}{\epsilon_c} \right) \quad (3.8)$$



Σχήμα 3.2: Τα στοιχεία του τανυστή αγωγιμότητας σαν συνάρτηση του ω για $\Delta = 0.06eV$, $\mu_F = 0.02eV$ και $\epsilon_c = 0.175eV$. Οι παράμετροι χαρακτηρίζουν τον τοπολογικό μονωτή Bi_2Se_3

όπου α η σταθερά της λεπτής υφής.

3.2 Χαμιλτονιανή *Dirac* με Δευτεροβάθμια Διαταραχή

Τώρα θα ξεκινήσουμε με μια Χαμιλτονιανή για φερμιόνια στην επιφάνεια ενός τοπολογικού μονωτή [23] της μορφής,

$$\mathcal{H} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \hbar v_F (k_x \sigma_y - k_y \sigma_x). \quad (3.9)$$

Ο πρώτος όρος δίνει την κινητική ενέργεια ενός φερμιονίου μάζας m , με τετραγωνική σχέση διασποράς ως προς την ορμή ($E \propto k^2$), ενώ ο δεύτερος είναι ο όρος *Dirac* που περιγράφει σχετικιστικά σωματίδια με ταχύτητα v_F και είναι κατάλληλος για να περιγράψουμε τοπολογικούς μονωτές. Όταν εφαρμόσουμε ένα μαγνητικό πεδίο στην κατεύθυνση z (κάθετα δηλαδή στη κίνηση των φερμιονίων), η Χαμιλτονιανή παίρνει την μορφή,

$$\mathcal{H} = \frac{\hbar^2 | -i\vec{\nabla} + e\vec{A}/\hbar |^2}{2m} + \alpha [(-i\partial_x + eA_x/\hbar)\sigma_y - (-i\partial_y + eA_y/\hbar)\sigma_x] \quad (3.10)$$

όπου \vec{A} το διανυσματικό δυναμικό και ορίσαμε $\alpha = \hbar v_F$. Επιλέγοντας την βαθμίδα *Landau*, οπότε $\vec{A} = (0, B\hat{x})$ βρίσκουμε ότι:

$$\mathcal{H} = \frac{\hbar^2 [(-i\partial_x)^2 + (-i\partial_y + eB\hat{x}/\hbar)^2]}{2m} + \alpha [(-i\partial_x)\sigma_y - (-i\partial_y + eB\hat{x}/\hbar)\sigma_x] \quad (3.11)$$

Ορίζουμε τώρα τους τελεστές δημιουργίας και καταστροφής ως εξής:

$$\begin{aligned} a^\dagger &= \frac{l_B}{\sqrt{2}} \left[-\partial_x + \frac{(x+x_0)}{l_B} \right] \\ a &= \frac{l_B}{\sqrt{2}} \left[\partial_x + \frac{(x+x_0)}{l_B} \right] \end{aligned} \quad (3.12)$$

όπου το μαγνητικό μήκος $l_B = \sqrt{\frac{\hbar}{e|B|}}$ και $x_0 = k_y l_B^2$. Η εξίσωση 3.11 γίνεται:

$$\mathcal{H} = \frac{\hbar^2[a^\dagger a + 1/2]}{ml_B} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \frac{\sqrt{2}\alpha}{l_B} \begin{pmatrix} 0 & a \\ a^\dagger & 0 \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

Τέλος αν προσθέσουμε ένα όρο *Zeeman* (Δ) η Χαμιλτονιανή παίρνει την τελική μορφή:

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2[a^\dagger a + 1/2]}{ml_B} + \Delta & \frac{\sqrt{2}\alpha}{l_B} a \\ \frac{\sqrt{2}\alpha}{l_B} a^\dagger & \frac{\hbar^2[a^\dagger a + 1/2]}{ml_B} - \Delta \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

Διαγωνοποιώντας την Χαμιλτονιανή βρίσκουμε τις ιδιοκαταστάσεις οι οποίες αποτελούν μια μίξη του σπίν πάνω $N-1$ επιπέδου *Landau* ($|N-1\rangle \uparrow$) και του σπίν κάτω N επιπέδου *Landau* ($|N\rangle \downarrow$), και το συμβολίζουμε με:

$$|N, s\rangle = \begin{pmatrix} C_{\uparrow, N, s} |N-1\rangle \uparrow \\ C_{\downarrow, N, s} |N\rangle \downarrow \end{pmatrix}. \quad (3.15)$$

Όπου για απλότητα θεωρήσαμε $\Delta=0$, το $s = \pm$ χαρακτηρίζει τις θετικές και αρνητικές ενεργειακές καταστάσεις αντίστοιχα. Οι ιδιόενέργειες είναι:

$$E_{N, s} = \frac{\hbar^2 N}{ml_B^2} + s \sqrt{\frac{\hbar^2}{2ml_B^2} + \frac{2N\alpha}{l_B^2}} \quad (3.16)$$

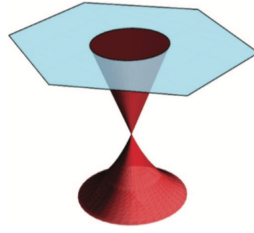
οπότε για $N=0$ βρίσκουμε ότι

$$E_{N=0} = \frac{\hbar^2}{2ml_B^2} = \frac{\hbar e |B|}{m} \quad (3.17)$$

Η ενέργεια E_0 είναι η κινητική ενέργεια που προέρχεται από τον τετραγωνικό όρο της Χαμιλτονιανής. Ενώ η ενέργεια $E'_0 = \frac{\hbar v_F}{l_B}$ προέρχεται από την συνεισφορά του γραμμικού όρου (*Dirac*) στην Χαμιλτονιανή. Έτσι μπορούμε να ορίσουμε ένα μέτρο που μας λέει πόσο μεγάλη είναι η συνεισφορά της διαταραχής στην Χαμιλτονιανή μας. Ορίζουμε λοιπόν την ποσότητα P σαν:

$$P = \frac{E'_0{}^2}{E_0} \quad (3.18)$$

Όταν $P \rightarrow \infty$ παίρνουμε την Χαμιλτονιανή του τοπολογικού μονωτή και όταν $P \rightarrow 0$ παίρνουμε τη Χαμιλτονιανή ενός του ελεύθερου σωματιδίου. Για



Σχήμα 3.3: Σχηματική αναπαράσταση του κώνου *Dirac* με κέντρο το σημείο Γ της ζώνης *Brillouin*. Ο πάνω κώνος αντιστοιχεί στη ζώνη αγωγιμότητας ενώ ο κάτω κώνος (που έχει σχήμα κλεψύδρας) αντιστοιχεί στη ζώνη σθένους (από [23]).

υλικά που αποτελούν τοπολογικούς μονωτές όπως Bi_2Te_3 βρίσκουμε $\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} = 0.048eV$ και $eBv_F^2\hbar = 1.2 \times 10^{-4}eV^2$ για μαγνητικό πεδίο 1T. Η ενεργός μάζα των ηλεκτρονίων στο Bi_2Te_3 είναι $m = 0.09m_e$ βρίσκουμε ότι $P = 74.2$ [7]. Ο κινητικός όρος παρέχει διόρθωση 8% για $N = 1, s = 1$ και ανεβαίνει μέχρι το 26% για $N = 10$.

Σε αντίθεση με την Χαμιλτονιανή του τοπολογικού μονωτή που είναι συμμετρική ως προς τις θετικές και αρνητικές ενέργειες ο τετραγωνικός όρος διαταραχής σπάει αυτή τη συμμετρία. Όπως μπορούμε να δούμε η σχέση διασποράς για την διαταραγμένη Χαμιλτονιανή (σχήμα 3.3) έχει σχήμα κώνου για την ζώνη αγωγιμότητας, ενώ η ζώνη σθένους παίρνει το σχήμα κλεψύδρας.

Γνωρίζοντας τις ιδιόκαταστάσεις και ιδιενέργειες του συστήματος (εξισώσεις 3.15 και 3.16) μπορούμε να βρούμε τον ταυστή αγωγιμότητας ενός συστήματος με επίπεδα *Landau* από τον τύπο του *Kubo*

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{i}{\omega} \lim_{\vec{q} \rightarrow 0} \Pi_{\alpha\beta}(\vec{q}, \omega). \quad (3.19)$$

Η συνάρτηση πολικότητας $\Pi_{\alpha\beta}(\vec{q}, \omega)$ δίνεται από την συνάρτηση συσχέτισης ρεύματος-ρεύματος [14]

$$\Pi_{\alpha\beta}(\vec{q}, \omega) = \frac{-1}{\mathcal{V}} \int_0^\beta d\tau e^{i\omega\tau} \langle T_\tau j_\alpha(\vec{q}, \tau) j_\beta(-\vec{q}, 0) \rangle \quad (3.20)$$

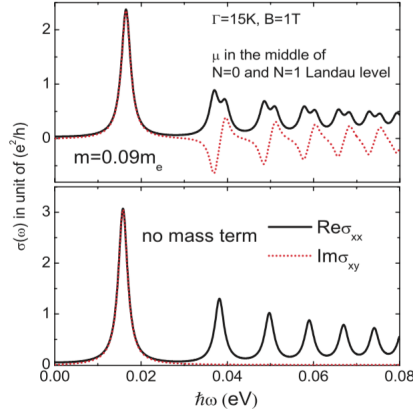
όπου \mathcal{V} ο όγκος και ο τελεστής αγωγιμότητας \vec{j} ορίζεται ως:

$$\vec{j} = -\frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\vec{A}} = ev_F\vec{\sigma} \quad (3.21)$$

ολοκληρώνοντας και παίρνοντας το όριο $q \rightarrow 0$ στην 3.19 βρίσκουμε ότι:

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{-i}{2\pi l_B^2} \sum_{N, N', s, s'} \frac{f_{N, s} - f_{N', s'}}{E_{N, s} - E_{N', s'}} \frac{\langle N, s | j_\alpha | N', s' \rangle \langle N', s' | j_\beta | N, s \rangle}{\omega - E_{N, s} + E_{N', s'} + i/2\tau} \quad (3.22)$$

τα στοιχεία του διανύσματος \vec{j} δίνονται από τις σχέσεις:



Σχήμα 3.4: Η $\sigma_{xx}^{\mathcal{R}}(\omega)$ και $\sigma_{xy}^{\mathcal{I}}(\omega)$ με και χωρίς μάζα. Το υπόλοιπο συχνότητας σκέδασης $\Gamma = \frac{1}{2\tau} = 15K$, $B = 1T$ και $m = 0.09m_e$ η ενεργός μάζα στο Bi_2Te_3 (από [23]).

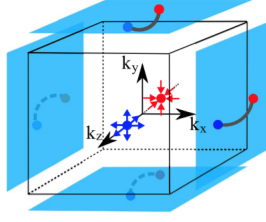
$$\begin{aligned}
 j_x &= e \left[v \frac{\hbar a^\dagger - a}{m \sqrt{2} l_B} I + \frac{\alpha}{\hbar} \sigma_y \right] \\
 J_y &= e \left[\frac{\hbar a^\dagger + a}{m \sqrt{2} l_B} I - \frac{\alpha}{\hbar} \sigma_x \right]
 \end{aligned} \tag{3.23}$$

ενώ $1/2\tau$ μικρό ολοκληρωτικό υπόλοιπο (*residual*) που χαρακτηρίζει τη συχνότητα σκέδασης και $f_{N,s} = \frac{1}{e^{\beta(\omega-\mu)}+1}$ η κατανομή *Fermi - Dirac*.

Σε αντίθεση με την ενότητα 3.1 που εστίασαμε στο στοιχείο $\sigma_{xy}^{\mathcal{R}}$ το οποίο οδηγεί σε διαφορά φάσης στο δεξιόστροφο και αριστερόστροφο κύμα (ανακλώμενο και διαδιδόμενο) σε αυτή την ενότητα θα εστιάσουμε στα στοιχεία $\sigma_{xx}^{\mathcal{R}}$ και $\sigma_{xy}^{\mathcal{I}}$ του τανυστή αγωγιμότητας που οδηγούν σε διαφορετική απορρόφηση για το δεξιόστροφο και αριστερόστροφο κύμα. Χρησιμοποιώντας την 3.22 βρίσκουμε ότι τα δύο μεγέθη θα περιγράφονται από τις σχέσεις [23]:

$$\begin{aligned}
 \begin{pmatrix} \sigma_{xx}^{\mathcal{R}}(\omega) \\ \sigma_{xy}^{\mathcal{I}}(\omega) \end{pmatrix} &= \pm \frac{e^2}{2\hbar} \sum_s \frac{f_0 - f_{1,s}}{E_0 - E_{1,s}} \frac{F(0, s)}{H(0, s)} E_0 [\delta(\hbar\omega - E_0 H(0, s)) \pm \delta(\hbar\omega + E_0 H(0, s))] \\
 &\pm \frac{e^2}{2\hbar} \sum_{N=1, s, s'} (f_{N,s} - f_{N+1, s'}) \frac{F(N, s, s')}{H(N, s, s')} E_0 [\delta(\hbar\omega - E_0 H(N, s, s')) \pm \delta(\hbar\omega + E_0 H(N, s, s'))]
 \end{aligned} \tag{3.24}$$

όπου το πρόσημο (+) αντιστοιχεί στην $\sigma_{xx}^{\mathcal{R}}(\omega)$ και το (-) στην $\sigma_{xy}^{\mathcal{I}}(\omega)$. Οι συναρτήσεις H και F ορίστηκαν ως εξής:



Σχήμα 3.5: Σχηματική αναπαράσταση του χώρου των ορμών όπου φαίνονται οι κόμβοι *Weyl* (αντίθετης χειρομορφίας) στα σημεία $\pm\vec{b}$. Ο μπλέ κόμβος λειτουργεί σαν πηγή καμπυλότητας *Berry* και ο κόκκινος σαν καταβόθρα. Προβάλλοντας τους κόμβους στις επιφάνειες τις ζώνης *Brillouin* παίρνουμε τα λεγόμενα “Τόξα Φέρμι” (Fermi Arcs) (από [14]).

$$\begin{aligned}
 H(N, s, s') &= -1 + s\sqrt{\frac{1}{4} + 2NP} - s'\sqrt{\frac{1}{4} + 2(N+1)P} \\
 H(0, s) &= -\frac{1}{2} - s\sqrt{\frac{1}{4} + 2P} \\
 F(N, s, s') &= \left(\sqrt{\frac{N}{2}} C_{\uparrow, N+1, s'}^* C_{\uparrow, N, s} + \sqrt{\frac{N+1}{2}} C_{\downarrow, N+1, s'}^* C_{\downarrow, N, s} - \sqrt{P} C_{\uparrow, N+1, s'}^* C_{\downarrow, N, s} \right)^2 \\
 F(0, s) &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}} C_{\downarrow, 1, s} - \sqrt{P} C_{\uparrow, 1, s} \right)^2
 \end{aligned} \tag{3.25}$$

Η γραφική παράσταση των $\sigma_{xx}^{\mathcal{R}}(\omega)$ και $\sigma_{xy}^{\mathcal{I}}(\omega)$ για πεπερασμένη μάζα και μηδενική μάζα 4.3 καταδεικνύει πως αλλάζει η συμπεριφορά του ταυστή αγωγιμότητας όταν προσθέτουμε σαν διαταραχή τον τετραγωνικό όρο.

3.3 Μοντελοποίηση Λεπτού Υμενίου από Τοπολογικό Ημιμέταλλο *Weyl*

Σε αυτή την ενότητα θα δούμε πως μπορούμε να ορίσουμε μια Χαμιλτονιανή που να περιγράφει ένα *TWS* και χρησιμοποιώντας τον τύπο του *Kubo* 3.19, να βρούμε τον γυροσκοπικό ταυστή αγωγιμότητας $\sigma_{\alpha\beta} = \sigma_{\alpha\beta}^{\mathcal{R}} + \sigma_{\alpha\beta}^{\mathcal{I}}$ που περιγράφει το υμένιο.

Θα μοντελοποιήσουμε ένα *TWS* που έχει δύο κόμβους *Weyl* αντίθετης χειρομορφίας στα σημεία $\pm\vec{b} = (0, 0, b)$ του χώρου των ορμών. Έτσι η χαμιλτονιανή για χαμηλές ενέργειες $k < k_c = \omega_c$ (όπου k_c, ω_c ο κυματριθμός και η ενέργεια αποκοπής αντίστοιχα) παίρνει την γνωστή γραμμική μορφή:

$$\mathcal{H} = \pm\hbar v_F \vec{\sigma} \cdot (\vec{k} \pm \vec{b}) \tag{3.26}$$

Χρησιμοποιώντας την 3.20 βρίσκουμε την συνάρτηση συσχέτισης ρεύματος-ρεύματος

$$\Pi_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}, i, i'} \frac{f(\epsilon_{i'}(\vec{k})) - f(\epsilon_i(\vec{k}))}{\hbar\omega + \epsilon_{i'}(\vec{k}) - \epsilon_i(\vec{k}) + i\hbar/2\tau} \langle \vec{k}i | j_a | \vec{k}i' \rangle \langle \vec{k}i' | j_b | \vec{k}i \rangle \quad (3.27)$$

όπου κατά τα γνωστά V ο όγκος, $1/2\tau$ ένα μικρό ολοκληρωτικό υπόλοιπο, $f(\epsilon)$ η κατανομή Φέρμι και ο τελεστής ρεύματος δίνεται από τη σχέση:

$$j_\alpha = -\frac{\delta\mathcal{H}}{\delta A_\alpha} = \pm e v_F \sigma_\alpha \quad (3.28)$$

Οι ιδιοκαταστάσεις και οι ιδιενέργειες υπολογίζονται από τη σχέση $\mathcal{H}|\vec{k}i\rangle = \epsilon_i(\vec{k})|\vec{k}i\rangle$ όπου $i = 1, 2$ οπότε για κάθε κυματαριθμό έχουμε δύο ιδιοκαταστάσεις. Υπολογίζουμε την συνάρτηση συσχέτισης ρεύματος-ρεύματος όταν η ενέργεια Φέρμι βρίσκεται κοντά στους κόμβους *Weyl* για ενέργειες $\epsilon < \hbar\omega_c$ και βρίσκουμε ότι η διαμήκης αγωγιμότητα δίνεται από τις σχέσεις:

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}^{\mathcal{R}}(\omega) &= \frac{e^2}{6\pi\hbar} \frac{\omega}{v_F} \\ \sigma_{xx}^{\mathcal{I}}(\omega) &= -\frac{e^2}{3\pi^2\hbar v_F} \left[\frac{\omega_c^2}{\omega} + \frac{\omega}{4} \ln \frac{|\omega^2 - 4\omega_c^2|}{\omega^2} \right]. \end{aligned} \quad (3.29)$$

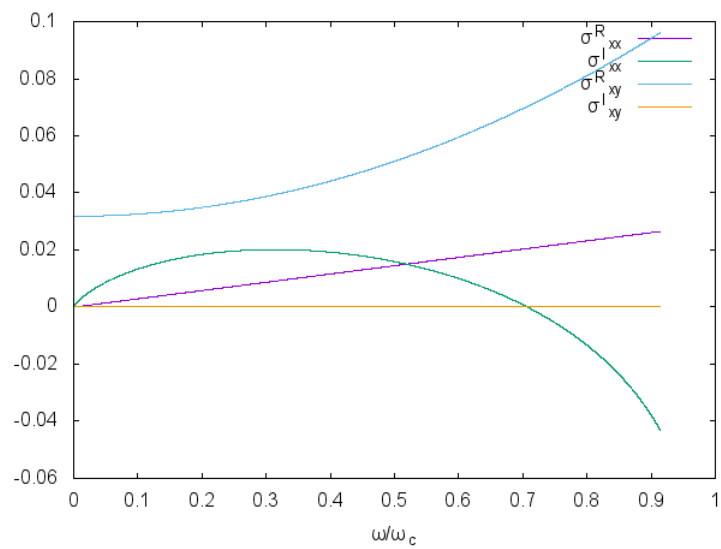
Σημειώνεται ότι οι Mehdi Kargarian, Mohit Randeria and Nandini Trivedi [14] έδειξαν ότι ο όρος στην $\sigma_{xx}^{\mathcal{I}}(\omega)$ που είναι ανάλογος του $\frac{1}{\omega}$ είναι πλασματικός. Πράγματι θεωρώντας την Χαμιλτονιανή πλέγματος που έχει σαν όριο μικρών ενεργειών την 3.26 οι όροι $\frac{1}{\omega}$ αλληλοαναιρούνται πλήρως τόσο στην διαμαγνητική όσο και στην παραμαγνητική απόκριση. Έτσι μπορούμε να τον αγνοήσουμε και έχουμε ότι:

$$\sigma_{xx}^{\mathcal{I}}(\omega) = -\frac{e^2}{3\pi^2\hbar v_F} \frac{\omega}{4} \ln \frac{|\omega^2 - 4\omega_c^2|}{\omega^2}. \quad (3.30)$$

Στο όριο των χαμηλών ενεργειών βρίσκουμε ότι η εγκάρσια αγωγιμότητα δίνεται από τη σχέση:

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^{\mathcal{R}}(\omega) &= \frac{e^2}{\pi\hbar} b + \frac{e^2}{6v_F^2\pi\hbar} \frac{b}{k_c^2 - b^2} \omega^2 \\ \sigma_{xy}^{\mathcal{I}}(\omega) &= \mathcal{O}(\omega^3) \end{aligned} \quad (3.31)$$

Στην ενότητα 2.3 αναφέραμε ότι η αγωγιμότητα *Hall* σε ένα τοπολογικό ημιμέταλλο *Weyl* εξαρτάται από την απόσταση των κόμβων *Weyl* και όπως βλέπουμε από την μοντελοποίηση των [14] η εξάρτηση είναι γραμμική ($\sigma_{xy}^{\mathcal{I}}(\omega) \propto b$).



Σχήμα 3.6: Η γραφική παράσταση των στοιχείων του τανυστή αγωγιμότητας για το ημιμέταλλο *Weyl* σε μονάδες $\frac{e^2}{h} \frac{1}{nm}$. Θεωρούμε τις παραμέτρους του Bi_2Se_3 , $\omega_c = 0.175eV$, $v_F = 5 \cdot 10^5 m s^{-1}$ και $\frac{b}{k_c} = \frac{1}{1.75}$.

Κεφάλαιο 4

Οπτικές Ιδιότητες Λεπτών Υμενίων

Σε αυτό το κεφάλαιο θα δούμε πως προκύπτουν οι οπτικές ιδιότητες της τοπολογικής ύλης στηριζόμενοι στην μοντελοποίηση των Χαμιλτονιανών του κεφαλαίου 3.

4.1 Γιγαντιαία Φαινόμενα *Kerr* και Φαινόμενα *Faraday* σε Λεπτά Υμένια Τοπολογικών Μονωτών

Όταν το φως σκεδάζεται απο μαγνητικά υλικά, στροφορμή μεταφέρεται στο ανακλώμενο (φαινόμενο *Kerr*) και στο διαδιδόμενο κύμα (φαινόμενο *Faraday*). Αν εκφράσουμε το ηλεκτρομαγνητικό κύμα στη βάση κυκλικά πολωμένου φωτός, τότε τα φαινόμενα *Kerr* και *Faraday* οδηγούν στη δημιουργία σχετικής διαφοράς φάσης στα δύο διανύσματα βάσης (αριστερόστροφο και δεξιόστροφο). Το επίπεδο πόλωσης του φωτός στρέφεται και η γωνία στροφής δίνεται απο τη σχέση:

$$\begin{aligned}\theta_F &= \frac{\arg(E_+^t) - \arg(E_-^t)}{2} \\ \theta_K &= \frac{\arg(E_+^r) - \arg(E_-^r)}{2}\end{aligned}\quad (4.1)$$

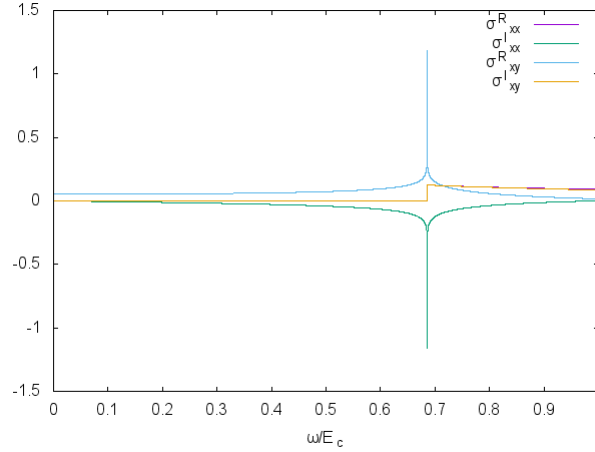
Όπου το δεξιόστροφο(+) και αριστερόστροφο(-) κύμα ορίστηκαν από τις σχέσεις:

$$\begin{aligned}E_+^{r,t} &= E_x^{r,t} + iE_y^{r,t} \\ E_-^{r,t} &= E_x^{r,t} - iE_y^{r,t}\end{aligned}\quad (4.2)$$

Αυτή η διαφορά στον τρόπο που αλληλεπιδρά το ηλεκτρομαγνητικό κύμα με το υλικό (ανάλογα με την χειρομορφία του) εμφανίζεται έντονα σε υλικά όπως οι τοπολογικοί μονωτές που όπως είπαμε εμφάνιζουν αγώγιμες χειρόμορφες καταστάσεις (εικ. 2.4).

Ο ταυιστής αγωγιμότητας της Χαμιλτονιανής *Haldane* 3.1 έχει την γυροσκοπική μορφή:

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & -\sigma_{xy} & 0 \\ \sigma_{xy} & \sigma_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{xx} \end{pmatrix}\quad (4.3)$$



Σχήμα 4.1: Τα στοιχεία του ταυστή αγωγιμότητας σαν συνάρτηση του ω για $\Delta = 0.06eV$, $\mu_F = 0.02eV$ και $\epsilon_c = 0.175eV$. Οι παραμέτροι χαρακτηρίζουν τον τοπολογικό μονωτή Bi_2Se_3

όπου τα στοιχεία σ_{xx} και σ_{xy} δίνονται από την 3.6. Όπως είπαμε οι [19] μοντελοποιούν τον τοπολογικό μονωτή σαν δύο επίπεδες επιφάνειες, στο ενδιάμεσο τον οποίον βρίσκεται ένα διηλεκτρικό. Θεωρώντας σχεδιάσεις από την πάνω και κάτω επιφάνεια βρίσκουμε ότι το ανακλώμενο και το διαδιδόμενο κύμα θα δίνονται από τις σχέσεις [19]:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} E_x^t \\ E_y^t \end{pmatrix} &= t_B(I - r'_T r_B)^{-1} t_T \begin{pmatrix} E_x^i \\ E_y^i \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} E_x^r \\ E_y^r \end{pmatrix} &= [r_T + t'_T r_B(I - r'_T r_B)^{-1} t_T] \begin{pmatrix} E_x^i \\ E_y^i \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.4)$$

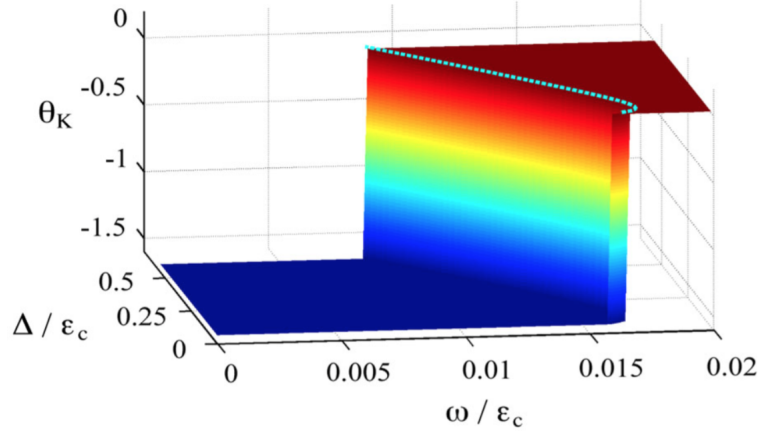
Από τις εξισώσεις των στοιχείων του ταυστή αγωγιμότητας 3.6 βρίσκουμε ότι για $\omega \ll \epsilon_c$, $\sigma_{xx}^R = \sigma_{xx}^I = \sigma_{xy}^I = 0$, $\sigma_{xy}^R = \alpha/4\pi(1 - \Delta/\epsilon_c)$. Το οποίο φαίνεται στο σχήμα 4.1 όταν το ω είναι κοντά στο μηδέν.

Θεωρώντας ότι τα διηλεκτρικά που περιβάλλουν τα δισδιάστατα επίπεδα είναι το κενό ($n = 1$) βρίσκουμε για το διαδιδόμενο και το ανακλώμενο κύμα ότι:

$$\begin{aligned} \vec{E}^t &= \begin{pmatrix} E_x^t \\ E_y^t \end{pmatrix} = \frac{1}{1 + (4\pi\sigma_{xy}^R)^2} \begin{pmatrix} E_x^i \\ 4\pi\sigma_{xy}^R E_y^i \end{pmatrix} \\ \vec{E}^r &= \begin{pmatrix} E_x^r \\ E_y^r \end{pmatrix} = \frac{1}{1 + (4\pi\sigma_{xy}^R)^2} \begin{pmatrix} -(4\pi\sigma_{xy}^R)^2 E_x^i \\ 4\pi\sigma_{xy}^R E_y^i \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.5)$$

Χρησιμοποιώντας τώρα τους ορισμούς 4.2 και 4.1 βρίσκουμε ότι:

$$\begin{aligned} \theta_F &= \arctan(4\pi\sigma_{xy}^R) = \arctan\left(\alpha\left(1 - \frac{\Delta}{\epsilon_c}\right)\right) \approx \arctan(\alpha) \\ \theta_K &= \arctan\left(\frac{1}{4\pi\sigma_{xy}^R}\right) = \arctan\left(\frac{-2}{\alpha\left(1 - \frac{\Delta}{\epsilon_c}\right)}\right) \approx -\frac{\pi}{2} \end{aligned} \quad (4.6)$$



Σχήμα 4.2: Η περιστροφή *Kerr* σαν συνάρτηση της συχνότητας ω/ϵ_c και του χάσματος Δ/ϵ_c . Η θ_K είναι σταθερή με τιμή $-\pi/2$ για μικρά ω και Δ (από [19]).

δηλαδή το ανακλώμενο κύμα παρουσιάζει περιστροφή 90° σε σχέση με το προσπίπτον κύμα.

Το αποτέλεσμα για την γωνία *Kerr* έχει τοπολογικό χαρακτήρα και καταδεικνύεται στην εικ. 4.2. Παρατηρούμε ότι για αρκετά μικρές συχνότητες ένας “καταρράκτης” διαχωρίζει την τετριμμένη από την μη τετριμμένη τοπολογική φάση.

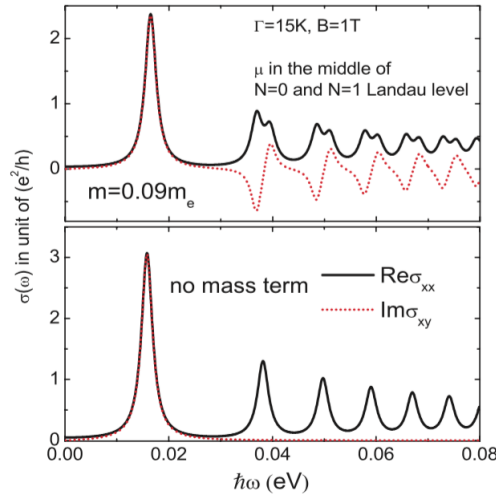
4.2 Η Επίδραση του Όρου Διαταραχής στις Οπτικές Ιδιότητες του Τοπολογικού Μονωτή

Έχοντας δει πως η Χαμιλτονιανή *Haldane* οδηγεί το κυκλικά πολωμένο φως σε διαφορετική αλληλεπίδραση με το υλικό ανάλογα με την χειρομορφία της ακτινοβολίας, στρέφουμε τώρα την προσοχή μας στην διαταραγμένη Χαμιλτονιανή της ενότητας 3.2 μέσα σε μαγνητικό πεδίο (χωρίς τον όρο *Zeeman*):

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 [a^\dagger a + 1/2]}{ml_B} & \frac{\sqrt{2}\alpha}{l_B} a \\ \frac{\sqrt{2}\alpha}{l_B} a^\dagger & \frac{\hbar^2 [a^\dagger a + 1/2]}{ml_B} \end{pmatrix} \quad (4.7)$$

η οποία όπως δείξαμε οδηγεί στα στοιχεία $\sigma_{xx}^{\mathcal{R}}(\omega)$ και $\sigma_{xy}^{\mathcal{I}}(\omega)$ τα οποία περιγράφουν την μαγνητό-οπτική αγωγιμότητα

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \sigma_{xx}^{\mathcal{R}}(\omega) \\ \sigma_{xy}^{\mathcal{I}}(\omega) \end{pmatrix} &= \pm \frac{e^2}{2\hbar} \sum_s \frac{f_0 - f_{1,s}}{E_0 - E_{1,s}} \frac{F(0, s)}{H(0, s)} E_0 [\delta(\hbar\omega - E_0 H(0, s)) \pm \delta(\hbar\omega + E_0 H(0, s))] \\ &\pm \frac{e^2}{2\hbar} \sum_{N=1, s, s'} (f_{N, s} - f_{N+1, s'}) \frac{F(N, s, s')}{H(N, s, s')} E_0 [\delta(\hbar\omega - E_0 H(N, s, s')) \pm \delta(\hbar\omega + E_0 H(N, s, s'))] \end{aligned} \quad (4.8)$$



Σχήμα 4.3: Η $\sigma_{xx}^{\mathcal{R}}(\omega)$ και $\sigma_{xy}^{\mathcal{I}}(\omega)$ με και χωρίς μάζα. Το υ-πόλοιπο συχνότητας σκέδασης $\Gamma = \frac{1}{2\tau} = 15K$, $B = 1T$ και $m = 0.09m_e$ η ενεργός μάζα στο Bi_2Te_3 (από [23]).

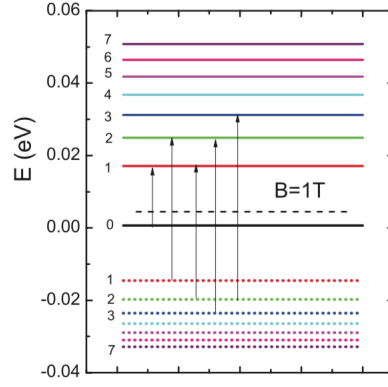
Για να καταλάβουμε αυτή την συμπεριφορά των $\sigma_{xx}^{\mathcal{R}}(\omega)$ και $\sigma_{xy}^{\mathcal{I}}(\omega)$ για πε-περασμένη μάζα και μηδενική μάζα (σχήμα 4.3) πρέπει να δούμε τις επιτρεπτές οπτικές μεταβάσεις (σχήμα 4.4).

Η πρώτη κορυφή των $\sigma_{xx}^{\mathcal{R}}(\omega)$ και $\sigma_{xy}^{\mathcal{I}}(\omega)$ προέρχεται από την μετάβαση $N = 0 \rightarrow N = 1$ (το βέλος με το μικρότερο μήκος). Υπάρχει μόνο ένα βέλος σε αυτή την περιοχή συχνοτήτων και για αυτό είναι η μόνη κορυφή για μικρά ω . Παρόλα αυτά καθώς το ω μεγαλώνει παρατηρούμε ότι έχουμε διαφορετική συμπεριφορά όταν υπάρχει και δεν υπάρχει ο όρος διαταραχής. Ο λόγος είναι ότι τώρα έχουμε δύο επιτρεπτές μεταβάσεις $N = 1$ (ζώνη σθένους) $\rightarrow N = 2$ (ζώνη αγωγιμότητας) και $N = 2$ (ζώνη σθένους) $\rightarrow N = 1$ (ζώνη αγωγιμότητας). Χωρίς τον τετραγωνικό όρο στην χαμιλτονιανή αυτά τα δύο βέλη θα είχαν το ίδιο μήκος οδηγώντας έτσι σε μια μόνο κορυφή, όπως και συμβαίνει στο πάνω μέρος του σχήματος 4.3. Όταν όμως υπεισέρχεται ο τετραγωνικός όρος στην Χαμιλτονιανή 3.2 η συμμετρία μεταξύ ζώνης σθένους και αγωγιμότητας δεν ευσταθεί (σχήμα 3.3), και η κορυφή σπάει σε δύο κορυφές. Η επίπτωση της διαταραχής είναι ακόμη πιο δραματική για την αγωγιμότητα *Hall* $\sigma_{xy}^{\mathcal{I}}(\omega)$.

Η κόκκινη διακεκομμένη καμπύλη στο πάνω μέρος του σχήματος 4.3 παρουσιάζει ταλάντωση γύρω από το μηδέν. Για την αδιατάρακτη Χαμιλτονιανή του τοπολογικού μονωτή, αυτές οι κορυφές εμφανίζονται στο ίδιο ω οπότε αλληλο-αναιρούνται πλήρως. Έτσι για $\omega > 0.03eV$ η $\sigma_{xy}^{\mathcal{I}}(\omega)$ είναι μηδενική.

4.3 Φαινόμενα *Kerr* και *Faraday* σε Τοπολογικά Ημιμέταλλα *Weyl*

Στην ενότητα 3.3 βρήκαμε τα στοιχεία του γυροσκοπικού τανυστή αγωγιμότητας για το ημιμέταλλο *Weyl*. Ομαδοποιώντας τις σχέσεις 3.29, 3.30, 3.31 έχουμε ότι:



Σχήμα 4.4: Μερικές επιτρεπτές οπτικές μεταβάσεις, με το χημικό δυναμικό να παρουσιάζεται με την μαύρη διακεκομμένη γραμμή (από [23]).

$$\begin{aligned}
\sigma_{xx}^{\mathcal{R}}(\omega) &= \frac{e^2}{6\pi\hbar} \frac{\omega}{v_F} \\
\sigma_{xx}^{\mathcal{I}}(\omega) &= -\frac{e^2}{3\pi^2\hbar v_F} \frac{\omega}{4} \ln \frac{|\omega^2 - 4\omega_c^2|}{\omega^2} \\
\sigma_{xy}^{\mathcal{R}}(\omega) &= \frac{e^2}{\pi\hbar} b + \frac{e^2}{6v_F^2\pi\hbar} \frac{b}{k_c^2 - b^2} \omega^2 \\
\sigma_{xy}^{\mathcal{I}}(\omega) &= \mathcal{O}(\omega^3)
\end{aligned} \tag{4.9}$$

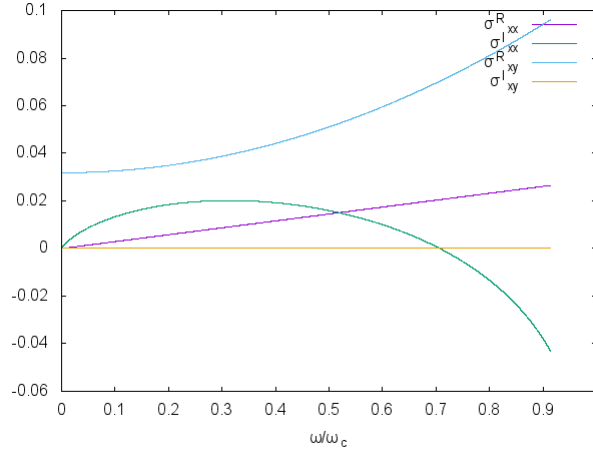
Θα μελετήσουμε τώρα το ανακλώμενο και διαδιδόμενο πεδίο όταν ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία με διεύθυνση μετάδοσης τον άξονα z προσπίπτει κάθετα σε πολύ λεπτό υμένιο από *TWS*. Θεωρούμε ότι το πάχος του υμενίου d είναι τέτοιο ώστε να είναι πολύ μικρότερο από το μήκος κύματος της προσπίπτουσας ακτινοβολίας $d \ll \lambda$. Θεωρούμε ότι το υμένιο βρίσκεται στο επίπεδο $z = 0$ και άρα χωρίζει τον χώρο σε δύο μέσα. Το μέσο i , $z < 0$ και j , $z > 0$ έτσι στα δύο μέσα θα έχουμε τις εξισώσεις:

$$i: \quad \vec{E}_i = e^{ik_i z} \begin{pmatrix} E_x^i \\ E_y^i \end{pmatrix} + \vec{E}_i = e^{-ik_i z} \begin{pmatrix} E_x^r \\ E_y^r \end{pmatrix} \tag{4.10}$$

$$j: \quad \vec{E}_j = e^{-ik_j z} \begin{pmatrix} E_x^t \\ E_y^t \end{pmatrix}$$

όπου ο κυματαριθμός $k_i = \omega n_i/c$ (με $n_i = \sqrt{\epsilon_i}$ συμβολίζεται ο δείκτης διάθλασης του μέσου i). Οι δείκτες i, r, t χαρακτηρίζουν το προσπίπτον, ανακλώμενο και διαδιδόμενο κύμα αντίστοιχα. Οι οριακές συνθήκες για $z = 0$ είναι:

$$\begin{aligned}
\vec{n} \times (\vec{E}_i - \vec{E}_j) &= 0 \\
\vec{n} \times (\vec{H}_i - \vec{H}_j) &= \vec{J}_s = \sigma^s \vec{E} = d\sigma \vec{E}
\end{aligned} \tag{4.11}$$



Σχήμα 4.5: Η γραφική παράσταση των στοιχείων του ταυνοστή αγωγιμότητας για το ημιμέταλλο Weyl σε μονάδες $\frac{e^2}{h} \frac{1}{nm}$. Για μικρά ω παρατηρούμε ότι επικρατεί ο όρος $\sigma_{xy}^R(\omega)$

Θεωρώντας ότι $n_i = n_j = n$ λύνουμε το πρόβλημα συνοριακών τιμών και βρίσκουμε ότι το ανακλώμενο και το διαδιδόμενο κύμα εκφράζονται σαν συνάρτηση του προσπίπτοντος:

$$\begin{aligned}
 E_x^t &= \frac{2(1 + n + \frac{d\sigma_{xx}}{c\epsilon_0})}{|1 + n + \frac{d\sigma_{xx}}{c\epsilon_0}|^2 + |\frac{d\sigma_{xx}}{c\epsilon_0}|^2} E_x^i \\
 E_y^t &= \frac{\frac{2d\sigma_{xy}}{c\epsilon_0}}{|1 + n + \frac{d\sigma_{xx}}{c\epsilon_0}|^2 + |\frac{d\sigma_{xx}}{c\epsilon_0}|^2} E_x^i \\
 E_x^r &= \frac{1 - (n + \frac{d\sigma_{xx}}{c\epsilon_0})^2 - (\frac{d\sigma_{xy}}{c\epsilon_0})^2}{|1 + n + \frac{d\sigma_{xx}}{c\epsilon_0}|^2 + |\frac{d\sigma_{xx}}{c\epsilon_0}|^2} E_x^i \\
 E_y^r &= \frac{\frac{2d\sigma_{xy}}{c\epsilon_0}}{|1 + n + \frac{d\sigma_{xx}}{c\epsilon_0}|^2 + |\frac{d\sigma_{xx}}{c\epsilon_0}|^2} E_x^i
 \end{aligned} \tag{4.12}$$

Μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε αυτές τις σχέσεις για να υπολογίσουμε τις γωνίες *Kerr* και *Faraday*. Εκφράζουμε το κύμα στη βάση του δεξιόστροφου και αριστερόστροφου κύματος $E_{\pm} = E_{\pm} \pm iE_{\pm}$, θα έχουμε:

$$\begin{aligned}
 E_+^t &= \frac{2\left[1 + n + \frac{d}{c\epsilon_0}(\sigma_{xx}^{\mathcal{R}} + i(\sigma_{xx}^{\mathcal{I}} + \sigma_{xy}^{\mathcal{R}}))\right]}{\left|1 + n + \frac{d\sigma_{xx}}{c\epsilon_0}\right|^2 + \left|\frac{d\sigma_{xx}}{c\epsilon_0}\right|^2} E_x^i \\
 E_-^t &= \frac{2\left[1 + n + \frac{d}{c\epsilon_0}(\sigma_{xx}^{\mathcal{R}} + i(\sigma_{xx}^{\mathcal{I}} - \sigma_{xy}^{\mathcal{R}}))\right]}{\left|1 + n + \frac{d\sigma_{xx}}{c\epsilon_0}\right|^2 + \left|\frac{d\sigma_{xx}}{c\epsilon_0}\right|^2} E_x^i \\
 E_+^r &= \frac{1 - \left|n + \frac{d\sigma_{xx}^{\mathcal{R}} + i\sigma_{xx}^{\mathcal{I}}}{c\epsilon_0}\right|^2 - \left|\frac{d\sigma_{xy}^{\mathcal{R}}}{c\epsilon_0}\right|^2 + i\frac{2d\sigma_{xy}}{c\epsilon_0}}{\left|1 + n + \frac{d\sigma_{xx}}{c\epsilon_0}\right|^2 + \left|\frac{d\sigma_{xx}}{c\epsilon_0}\right|^2} E_x^i \\
 E_-^r &= \frac{1 - \left|n + \frac{d\sigma_{xx}^{\mathcal{R}} + i\sigma_{xx}^{\mathcal{I}}}{c\epsilon_0}\right|^2 - \left|\frac{d\sigma_{xy}^{\mathcal{R}}}{c\epsilon_0}\right|^2 - i\frac{2d\sigma_{xy}}{c\epsilon_0}}{\left|1 + n + \frac{d\sigma_{xx}}{c\epsilon_0}\right|^2 + \left|\frac{d\sigma_{xx}}{c\epsilon_0}\right|^2} E_x^i
 \end{aligned} \tag{4.13}$$

Για αρκετά μικρό ω έχουμε ότι $\sigma_{xx}^{\mathcal{I}} + \sigma_{xy}^{\mathcal{R}} \approx \sigma_{xy}^{\mathcal{R}}$ (σχήμα 4.6), οπότε οι σχέσεις 4.13 απλοποιούνται. Τώρα θεωρώντας ότι $n = 1$ και $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar}$ (η σταθερά λεπτής υφής), βρίσκουμε ότι:

$$\begin{aligned}
 \arg(E_+^t) &= \arg(-E_-^t) = \arctan\left[\frac{2\alpha bd/\pi}{2 + \frac{\alpha\omega d}{3v_F}}\right] \\
 \arg(E_+^r) &= \arg(-E_-^r) = \arctan\left[\frac{-4\alpha bd/\pi}{\frac{\alpha\omega d^2}{3v_F} + \frac{2\alpha\omega d}{3v_F} + \frac{2\alpha bd^2}{\pi}}\right]
 \end{aligned} \tag{4.14}$$

Από τη σχέση $\arctan(x) = -\arctan(-x)$ και τις σχέσεις ορισμού για τις γωνίες *Kerr* και *Faraday* 4.1 καταλήγουμε ότι [14]:

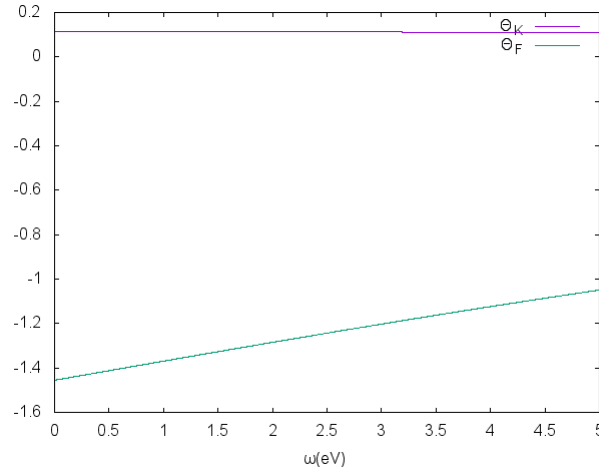
$$\begin{aligned}
 \tan(\theta_F) &= \frac{2\alpha bd/\pi}{2 + \frac{\alpha\omega d}{3v_F}} \\
 \tan(\theta_K) &= \frac{-4\alpha bd/\pi}{\left(\frac{\alpha\omega d}{3v_F}\right)^2 + \frac{2\alpha\omega d}{3v_F} + \left(\frac{2\alpha bd}{\pi}\right)^2}
 \end{aligned} \tag{4.15}$$

Στις πιο χαμηλές συχνότητες βρίσκουμε ότι:

$$\tan(\theta_F) = \alpha bd/\pi = -\cot(\theta_K) \tag{4.16}$$

Για τυπικό πάχος υμενίου 50 – 100nm βρίσκουμε ότι η γωνία *Kerr*, θ_K μπορεί να πάρει πολύ μεγάλες τιμές (μέχρι 70° – 80°). Επίσης σημειώνουμε ότι όταν η ενέργεια της ακτινοβολίας βρίσκεται μεταξύ $\frac{6v_F b}{\pi} < \omega < \frac{3v_F}{ad}$ οι δύο όροι στον παρονομαστή της σχέσης 4.15 για το θ_K μπορούν να αγνοηθούν, έτσι βρίσκουμε ότι η θ_K είναι ανεξάρτητη του πάχους d . Συγκεκριμένα:

$$\tan(\theta_K) = \frac{-6v_F b}{\pi\omega}. \tag{4.17}$$



Σχήμα 4.6: Οι γωνίες *Kerr* και *Faraday* για το ημιμέταλλο *Weyl* σε *rad*. Οι παραμέτροι που χρησιμοποιήθηκαν αντιστοιχούν σε ρεαλιστικές παραμέτρους *TWS*. Συγκεκριμένα έχουμε ότι $d = 100nm$, $v_F = 10^6m/s$

4.4 Σύγκριση Αποτελεσμάτων και Σύνοψη

Σε αυτή την ενότητα θα σχολιάσουμε και θα συγκρίνουμε τα αποτελέσματα του κεφαλαίου 4. Θα ξεκινήσουμε θεωρώντας μια διαφορετική προσέγγιση για την εξαγωγή των θ_K και θ_F της υποενότητας 4.1, συγκρίνοντας και σχολιάζοντας τις δύο προσεγγίσεις. Στην συνέχεια σχολιάζουμε τις διαφορές μεταξύ των οπτικών ιδιοτήτων του τοπολογικού μονωτή και του ημιμετάλλου *Weyl*. Στη τελευταία υποενότητα δείχνουμε πως μια διαταραχή (δευτέρου βαθμού ως προς τον κυματριθμό) στην Χαμιλτονιανή του τοπολογικού μονωτή οδηγεί στην εμφάνιση χειρομορφίας στην απορρόφηση.

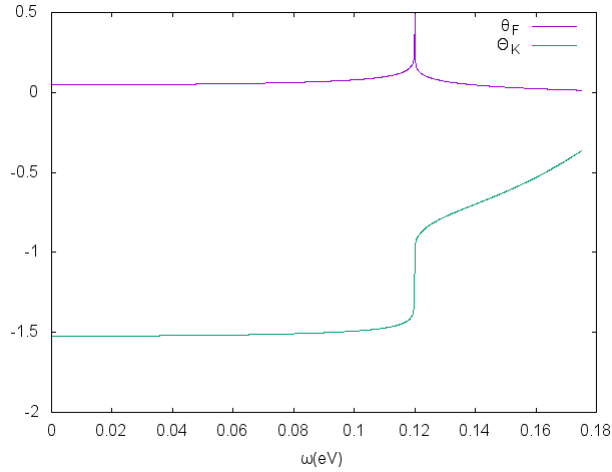
4.4.1 Προσέγγιση Υπερλεπτών Υμενίων στον Τοπολογικό Μονωτή

Στην ενότητα 4.1 είδαμε ότι μπορούμε να μοντελοποιήσουμε τον τοπολογικό μονωτή σαν δύο δισδιάστατες πλάκες που μεταξύ τους βρίσκεται ένα διηλεκτρικό. Θεωρώντας σχεδιάσεις από την πάνω και κάτω πλάκα βρήκαμε ότι για μικρά ω οι γωνίες *Kerr* και *Faraday* παίρνουν τις τοπολογικές τιμές της εξίσωσης 4.6.

Μια διαφορετική προσέγγιση για τις γωνίες *Kerr* και *Faraday* προκύπτει αν θεωρήσουμε υπέρλεπτα υμένα πάχους d [14]. Θεωρούμε την χαμιλτονιανή *Haldane* και τον γυροσκοπικό τανυστή αγωγιμότητας που προκύπτει από αυτήν (ενότητα 3.1), (τα στοιχεία του τανυστή δίνονται από την 3.6).

Θα μελετήσουμε τώρα το ανακλώμενο και το διαδιδόμενο πεδίο όταν ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία με διεύθυνση μετάδοσης τον άξονα z προσπίπτει κάθετα σε πολύ λεπτό υμένιο από τοπολογικό μονωτή. Ακολουθούμε την προσέγγιση της ενότητας 4.3, οπότε το πάχος του υμενίου d είναι τέτοιο ώστε να είναι πολύ μικρότερο από το μήκος κύματος της προσπίπτουσας ακτινοβολίας $d \ll \lambda$.

Λύνουμε το πρόβλημα συνοριακών τιμών και βρίσκουμε ότι το ανακλώμενο και το διαδιδόμενο κύμα εκφράζονται σαν συνάρτηση του προσπίπτοντος από τις σχέσεις 4.12.



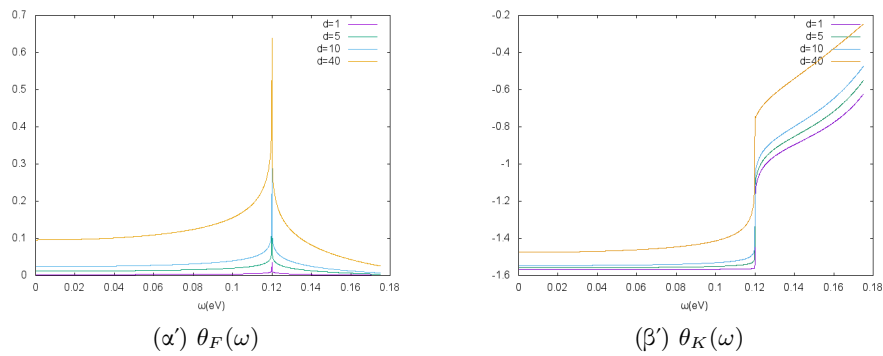
Σχήμα 4.7: Οι γωνίες *Kerr* και *Faraday* χρησιμοποιώντας την προσέγγιση λεπτών υμενίων. Παρατηρούμε ότι $\theta_K \approx -\frac{\pi}{2}$ και $\theta_F \approx \arctan(\alpha) \approx 0$ σε συμφωνία με τους [19]

Μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε αυτές τις σχέσεις για να υπολογίσουμε τις γωνίες *Kerr* και *Faraday*. Εκφράζουμε το κύμα στη βάση του δεξιόστροφου και αριστερόστροφου κύματος $E_{\pm} = E_{\pm} \pm iE_{\pm}$ και προκύπτει ότι:

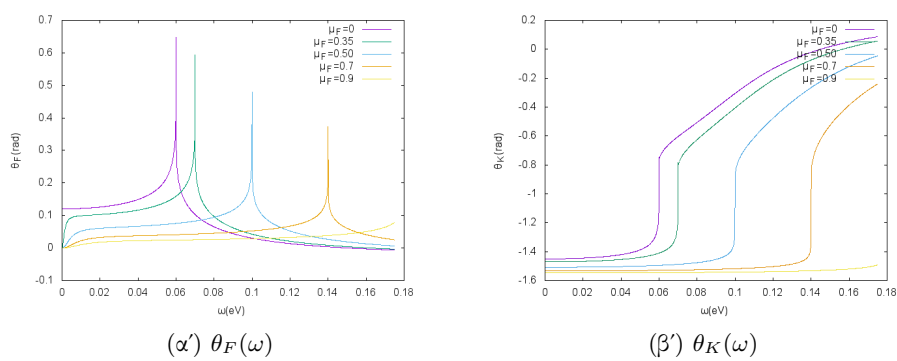
$$\begin{aligned} \arctan(E_{\pm}^t) &= \arctan\left(\frac{\lambda\sigma_{xx}^I \pm \lambda\sigma_{xy}^R}{1 + n + \lambda\sigma_{xx}^R \mp \lambda\sigma_{xy}^I}\right) \\ \arctan(E_{\pm}^t) &= \arctan\left(\frac{\pm 2\lambda\sigma_{xy}^R}{1 - (n + \lambda\sigma_{xx}^R)^2 - (\lambda\sigma_{xy}^R)^2 - (\lambda\sigma_{xy}^I)^2 \mp \lambda\sigma_{xy}^I}\right) \end{aligned} \quad (4.18)$$

όπου $\lambda = 4\pi ad$ (a η σταθερά της λεπτής υφής) η σχέση 4.1 μας δίνει της γωνίες *Kerr* και *Faraday* (εικ. ;;). Παρατηρούμε ότι για $\omega < 0.12\text{eV}$ οι γωνίες θ_F και θ_K παρουσιάζουν τοπολογική φύση, καθώς είναι ανεξάρτητες του ω . Για μεγαλύτερα ω φαίνεται ότι έχουμε αλλαγή τοπολογικής φάσης με τις γωνίες θ_F και θ_K να εξαρτώνται από το ω . Είναι αξιοσημείωτο ότι στις σχέσεις 4.18 υπάρχει εξάρτηση από το πάχος του λεπτού υμενίου d σε αντίθεση με την ενότητα 4.1. Στην εικ. 4.8 φαίνεται η εξάρτηση των θ_F και θ_K από το πάχος του υμενίου. Αντιπαραβάλλοντας τις γραφικές αυτές με τα αποτελέσματα ;;, παρατηρούμε ότι οι δύο προσεγγίσεις συμφωνούν για την μη-ρεαλιστική τιμή πάχους $d = 2nm$. Για μεγαλύτερο πάχος η $|\theta_K|$ συγκλίνει σε μικρότερες τιμές από $\frac{\pi}{2}$ όταν $\omega \rightarrow 0$, ενώ η θ_F συγκλίνει σε μεγαλύτερες τιμές από την $\arctan(a) \approx 0$.

Τέλος σημειώνουμε την εξάρτηση των στροφών *Kerr* και *Faraday* από την ενέργεια Φέρμι μ_F . Πειράματα έδειξαν ότι μπορούμε να ρυθμίσουμε την ενέργεια Φέρμι σε τοπολογικούς μονωτές (όπως τον Bi_2Te_3), με εναπόθεση ατόμων, μοριακή απορρόφηση ή *photodoping* [22]. Στο σχήμα 4.9 φαίνεται ότι ντοπάροντας τον τοπολογικό μονωτή οδηγούμε την τοπολογική μετάβαση να συμβαίνει όλο και σε μεγαλύτερες συχνότητες. Επίσης μεγαλύτερο ντοπάρωμα οδηγεί σε μεγαλύτερη συμφωνία με τις σχέσεις των [19] ;;.



Σχήμα 4.8: Οι γωνίες *Faraday* και *Kerr* για διαφορετικό πάχος υμενίου. Το πάχος μετριέται σε *nm*, οπότε για πραγματικές δομές ($d > 20nm$) παρατηρούμε απόκλιση από την συμπεριφορά που υπολόγισαν οι [19]



Σχήμα 4.9: Οι γωνίες *Faraday* και *Kerr* για διαφορετική ενέργεια Φέρμι. Παρατηρούμε μεταβολή της συχνότητας στην οποία ισχύει η τοπολογική κατάσταση και ελαφριά μεταβολή στις γωνίες θ_K , θ_F

4.4.2 Διαφορές Οπτικών Ιδιοτήτων Μεταξύ TI και TWS

Τα τοπολογικά ημιμέταλλα *Weyl* αποτελούν ένα είδος ενδιάμεσης κατάστασης μεταξύ του κοινού και του τοπολογικού μονωτή (ή της ανώμαλης κβαντικής κατάστασης *Hall*) [3]. Τα TWS αποτελούνται από δύο κόμβους *Weyl* αντίθετης χειρομορφίας, με σχετική απόσταση b στο χώρο των ορμών. Λέμε ότι είναι μια ενδιάμεση κατάσταση ανάμεσα στον τοπολογικό μονωτή και το κενό (κοινό μονωτή) γιατί η αγωγιμότητα *Hall* στο TWS εξαρτάται από την απόσταση των κόμβων. Στο όριο που κόμβοι εκφυλίζονται σε ένα κώνο *Dirac* έχουμε την κατάσταση του τοπολογικού μονωτή, ενώ όταν οι κώνοι αλληλοαναιρούνται στο κέντρο της ζώνης *Brillouin* παίρνουμε την τετριμμένη τοπολογική κατάσταση του κενού.

Στο όριο των πολύ μικρών συχνοτήτων βρήκαμε ότι οι γωνίες *Kerr* και *Faraday* για τον TWS δίνονται από τις σχέσεις:

$$\begin{aligned} \tan(\theta_F) &= \alpha b d / \pi \\ \tan(\theta_K) &= -\frac{1}{\alpha b d / \pi}, \end{aligned} \quad (4.19)$$

ενώ οι αντίστοιχες σχέσεις για τον τοπολογικό μονωτή είναι:

$$\begin{aligned} \tan(\theta_F) &= \alpha \\ \tan(\theta_K) &= -\frac{1}{\alpha}. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Επειδή $\alpha \approx \frac{1}{137}$, προκύπτει ότι $\theta_F \ll 1^\circ$ για τον τοπολογικό μονωτή. Για τον TWS έχουμε εξάρτηση από το πάχος και την απόσταση των κόμβων *Weyl* και η εφαπτομένη της γωνίας *Faraday* πολλαπλασιάζεται με ένα παράγοντα $\frac{bd}{\pi}$ ενώ η εφαπτομένη της γωνίας *Kerr* διαιρείται με αυτόν. Επειδή $bd \gg 1$ παρατηρούμε μεγάλη ενίσχυση στη γωνία *Faraday* και μείωση στη γωνία *Kerr*.

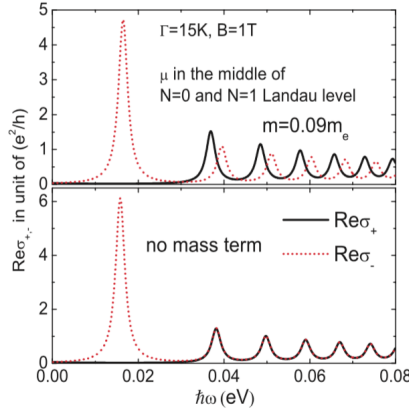
4.4.3 Φαινόμενα Χειρομορφίας στην Απορρόφηση για την Διαταραγμένη Χαμιλτονιανή του Τοπολογικού Μονωτή

Είδαμε πως μεταβάλλονται οι οπτικές ιδιότητες ενός τοπολογικού μονωτή, προσθέτοντας έναν τετραγωνικό όρο (ως προς την ορμή) διαταραχής. Σε αυτή την περίπτωση η ζώνη αγωγιμότητας και η ζώνη σθένους δεν έχουν συμμετρία κατοπτρισμού (εικ. 3.3). Έτσι οι οπτικές μεταβάσεις από την στοιβάδα N της ζώνης σθένους στην στοιβάδα $N + 1$ διαφέρουν ενεργειακά από τις μεταβάσεις $N + 1 \rightarrow N$. Αυτό έχει σαν συνέπεια τον διαχωρισμό των κορυφών απορρόφησης της $\sigma_{xx}^R(\omega)$ και της $\sigma_{xy}^I(\omega)$ σε δύο κορυφές.

Αυτή η δομή κορυφών που περιγράψαμε για τις $\sigma_{xx}^R(\omega)$ και $\sigma_{xy}^I(\omega)$ έχει σημαντικές συνέπειες στην αγωγιμότητα για κυκλικά πολωμένη ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία. Ορίζουμε την δεξιόστροφα(+) και αριστερόστροφα(-) κυκλικά πολωμένη αγωγιμότητα ως:

$$\sigma_{\pm}(\omega) = \sigma_{xx}(\omega) \pm i\sigma_{xy}(\omega). \quad (4.21)$$

Στο σχήμα 4.10 φαίνεται η εξάρτηση του πραγματικού μέρους των σ_{\pm} το οποίο περιγράφει την απορρόφηση του δεξιόστροφα και του αριστερόστροφα



Σχήμα 4.10: Το πραγματικό μέρος της δεξιόστροφα(+) και αριστερόστροφα (-) κυκλικά πολωμένης αγωγιμότητας σε μονάδες $\frac{e^2}{h}$. Η μάζα στον τετραγωνικό όρο είναι $m = 0.09m_e$ (πάνω σχήμα) ενώ για την αδιατάρακτη Χαμιλτονιανή του τοπολογικού μονωτή $m = \infty$ (κάτω σχήμα). Τέλος θεωρούμε $\alpha/\hbar = 4.3 \times 10^5 \text{m/s}$ (από [23]).

κυκλικά πολωμένου κύματος αντίστοιχα. Παρατηρούμε ότι για τις $\sigma_{\pm}^{\mathcal{R}}$ δεν υπάρχει η συμπεριφορά της διάσπασης των κορυφών σε δύο, όπως είχαμε για τις $\sigma_{xx}^{\mathcal{R}}(\omega)$ και $\sigma_{xy}^{\mathcal{I}}(\omega)$. Επίσης τόσο στην αδιατάρακτη (κάτω σχήμα) όσο και στην διαταραγμένη Χαμιλτονιανή απουσιάζει η πρώτη κορυφή από την $\sigma_+^{\mathcal{R}}$.

Τώρα στην αδιατάρακτη Χαμιλτονιανή παρατηρούμε ότι για $\omega > 0.03\text{eV}$ το υλικό αλληλεπιδρά με τον ίδιο τρόπο στην δεξιόστροφη και αριστερόστροφη ακτινοβολία. Ο όρος διαταραχής αίρει αυτήν την συμμετρία όπως φαίνεται στο πάνω σχήμα της 4.10. Οι κορυφές των σ_+ και σ_- μετατοπίζονται, με την σ_- να μετατοπίζεται δεξιά και την σ_+ αριστερά. Αυτές οι μετατοπίσεις μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να καθοριστεί πειραματικά η συνεισφορά του τετραγωνικού όρου διαταραχής στην Χαμιλτονιανή.

Βιβλιογραφία

- [1] A. Ullah, K. Sabeeh. «*Optical Conductivity of Topological Insulator Thin Films in a Quantizing Magnetic Field*». Στο: *J. Phys.: Condens. Matter* 26 (2014).
- [2] A.A. Burkov and Leon Balents. «*Weyl Semimetal in a Topological Insulator Multilayer*». Στο: *Phys Rev Let* 82 (2010).
- [3] A.A. Burkov, M.D. Hook, and Leon Balents. «*Topological nodal semimetals*». Στο: *Phys. Rev. B* 84 (2011).
- [4] Accidental Degeneracy in the Energy Bands of Crystals. «*Topological semimetal and Fermi-arc surface states in the electronic structure of pyrochlore iridates*». Στο: *Phys. Rev. B* 83 (2011).
- [5] C. L. Kane and E. J. Mele. «*Quantum Spin Hall Effect in Graphene*». Στο: *Phys. Rev. Lett.* 98 (2005).
- [6] Chao-Xing Liu, Shou-Cheng Zhang and Xiao-Liang Qi. «*The quantum anomalous Hall effect*». Στο: *Advances in Physics* 64 (2015).
- [7] Chao-Xing Liu, Xiao-Liang Qi, HaiJun Zhang, Xi Dai, Zhong Fang, and Shou-Cheng Zhang. «*Model Hamiltonian for topological insulators*». Στο: *PHYSICAL REVIEW B* 82 (2010).
- [8] D. Hsieh, Y. Xia, L. Wray, D. Qian, A. Pal, J. H. Dil, J. Osterwalder, F. Meier, G. Bihlmayer, C. L. Kane, Y. S. Hor, R. J. Cava and M. Z. Hasan. «*Observation of Unconventional Quantum Spin Textures in Topological Insulators*». Στο: *Science* 323 (2009).
- [9] F. D. M. Haldane. «*Model for a Quantum Hall Effect without Landau Levels: Condensed-Matter Realization of the "Parity Anomaly"*». Στο: *Phys. Rev. Lett.* 61 (1988).
- [10] John David Jackson. *Classical Electrodynamics Third Edition*. New York: Wiley, 1998.
- [11] K. v. Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper. «*New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance*». Στο: *Phys. Rev. Lett.* 45 (1980).
- [12] Karbaschi Hossein†, Reza Rashedi Gholam. «*Perfect GMR effect in gapped graphene-based ferromagnetic–normal–ferromagnetic junctions*». Στο: *Chinese Physics B* 24 (2015).
- [13] M. Z. Hasan, C. L. Kane. «*Topological Insulators*». Στο: *Rev. Mod. Phys.* 82 (2010).
- [14] Mehdi Kargarian, Mohit Randeria and Nandini Trivedi. «*Theory of Kerr and Faraday rotations and linear dichroism in Topological Weyl Semimetals*». Στο: *Nature* 82 (2015).
- [15] Mikio Nakahara. *Geometry, Topology and Physics, Second Edition*. CRC Press, 2003.

- [16] Mungan, C.E. «*Faraday Isolators and Kirchhoff's Law: A Puzzle*». Στο: (1999).
- [17] Qin Zhang, Giuseppe Iannaccone, Gianluca Fiori. «*Two-Dimensional Tunnel Transistors Based on Bi₂Se₃ Thin Film*». Στο: *IEEE ELECTRON DEVICE LETTERS* 35 (2014).
- [18] Thouless, D. J., M. Kohmoto, M. P. Nightingale and M. den Nijs. «*Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential*». Στο: *Phys. Rev. Lett.* 49 (1982), σ. 408.
- [19] Wang-Kong Tse, A. H. MacDonald. «*Giant Magneto-Optical Kerr Effect and Universal Faraday Effect in Thin-Film Topological Insulators*». Στο: *Phys. Rev. Lett.* 105 (2010).
- [20] Xiangang Wan, Ari M. Turner, Ashvin Vishwanath, and Sergey Y. Savrasov. «*Topological semimetal and Fermi-arc surface states in the electronic structure of pyrochlore iridates*». Στο: *Phys. Rev. B* 83 (2011).
- [21] Xiao-Liang Qi and Shou-Cheng Zhang. «*Topological insulators and superconductors*». Στο: *Rev. Mod. Phys.* 83 (2011).
- [22] Y. Xia, D. Qian, D. Hsieh, R. Shankar, H. Lin, A. Bansil, A.V. Fedorov, D. Grauer, Y.S. Hor, R.J. Cava, M.Z. Hasan. «*Topological Control: Systematic control of topological insulator Dirac fermion density on the surface of Bi₂Te₃*». Στο: *arXiv:0907.3089* (2009).
- [23] Zhou Li1, and J. P. Carbotte. «*Magneto-optical conductivity in a topological insulator*». Στο: *PHYSICAL REVIEW B* 88 (2013).