

6. TR-invariante topologische Isolatoren, Quanten-Spin-Hall Effekt (QSHE)

15 Jahre nach Haldanes Modell eines Chernisolators haben Kane und Mele entdeckt, daß topologische Isolatoren existieren die die TR-Symmetrie nicht brechen.

C.L. Kane, E.J. Mele Phys. Rev. Lett. 95, 226801 (2005)

Diesem Modell kann ein zweiter Typ topologischer Invarianten zugeordnet werden, die eine $\mathbb{Z}_2$ Invariante ist (2 Werte ± 1)

Das Kane-Mele Modell entsteht aus Verdopplung des Haldane Modells durch Hinzunahme einer echten Spinfreiheit und Spin-Orbit Kopplung

6.1. Kontinuumsversion des Kane-Mele Modells

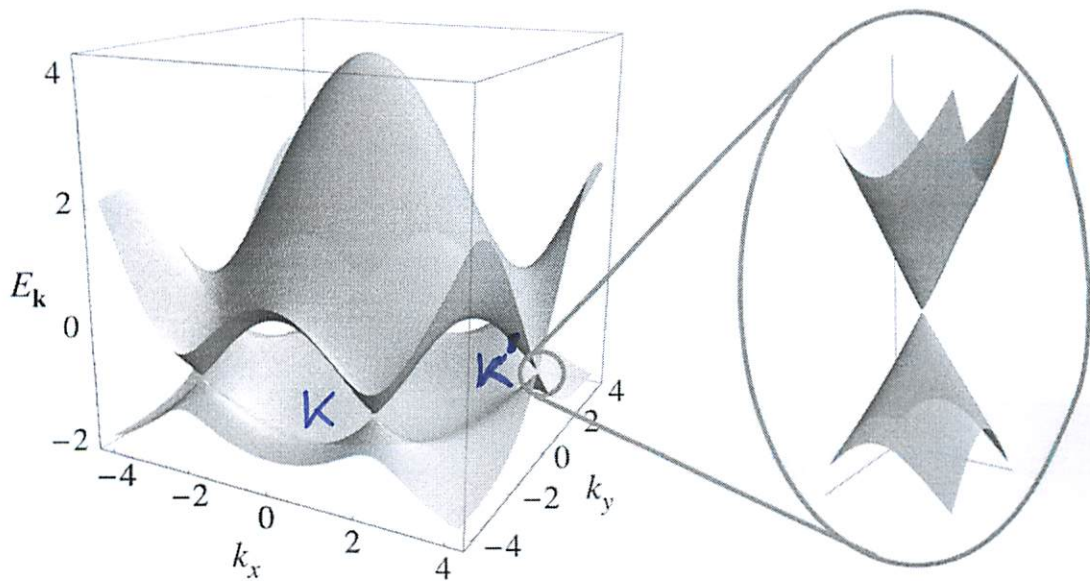
- Ausgangspunkt ist Niedrigenergienäherung von Graphene ($E \approx 0$) Gl. (5.4)

$$(6.1) \quad \begin{aligned} \underline{h}(\vec{k} + \delta \vec{k}) &= -\frac{3}{2} t_1 (\delta k_x \sigma_x + \delta k_y \sigma_y) \\ \underline{h}(\vec{k}' + \delta \vec{k}) &= -\frac{3}{2} t_1 (-\delta k_x \sigma_x + \delta k_y \sigma_y) \end{aligned}$$

σ_x, σ_y Pauli-Matrizen im Raum der zwei Bänder

entspricht 2-bandpaarigen Dirac Fermionen

$$\underline{\psi}(\vec{r}) = \begin{pmatrix} U_{A\vec{k}}(\vec{r}) \psi_{A\vec{k}}(\vec{r}) \\ U_{B\vec{k}}(\vec{r}) \psi_{B\vec{k}}(\vec{r}) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} U_{A\vec{k}'}(\vec{r}) \psi_{A\vec{k}'}(\vec{r}) \\ U_{B\vec{k}'}(\vec{r}) \psi_{B\vec{k}'}(\vec{r}) \end{pmatrix}$$



wobei $U_{A\vec{k}}(\vec{r})$ etc. die Blochfunktionen bei $\vec{b} \approx \vec{K}$ bedeuten.
 Umschreiben von (6.1) führt dann auf das Vielteilchen-
 hamiltonian im Ortsraum

$$(6.2) \quad \boxed{H_0 = -i\hbar v_F \underline{\hat{\psi}}^\dagger(\vec{r}) (\sigma_x \tau_z \partial_x + \sigma_y \partial_y) \underline{\hat{\psi}}(\vec{r})}$$

mit $v_F = -\frac{3}{2} a t_1$ (a -Gitterabstände)

$$\underline{\hat{\psi}}(\vec{r}) = \left(\hat{\psi}_{A\vec{k}}(\vec{r}), \hat{\psi}_{B\vec{k}}(\vec{r}), \hat{\psi}_{A\vec{k}'}(\vec{r}), \hat{\psi}_{B\vec{k}'}(\vec{r}) \right)^T$$

ist formal ein Bi-Spinor bzgl den beiden
 Untergittern A und B (bzw 2 Bändern) und bzgl.
 der $\vec{k}$ und $\vec{k}'$ Punkte

σ_x, σ_y sind Paulimatrizen die in dem Unterraum, (ψ_{Ak}, ψ_{Bk}) bzw. $(\psi_{Ak'}, \psi_{Bk'})$ wirken und

$$\tau_z \equiv \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_2 \end{pmatrix} \quad \begin{matrix} \leftarrow k \\ \leftarrow k' \end{matrix}$$

Matrix-Form von (6.2) ist

$$(6.3) \quad H_0 = -i\hbar v_F \begin{pmatrix} \hat{\psi}^\dagger \\ \hat{\psi} \end{pmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_x \partial_x + \sigma_y \partial_y & 0 \\ 0 & -\sigma_x \partial_x + \sigma_y \partial_y \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\psi} \\ \hat{\psi} \end{pmatrix}$$

• Hinzunahme des Elektronenspins (intrinsic spin)

$\Rightarrow$ Verdopplung des Zustandsraumes $\hat{\psi} \rightarrow 8$ Komponenten.
Matrix in (6.3) wird aus 4×4 zu 8×8 Matrix

Zusätzlich Spin-Orbit Kopplung

$$(6.4) \quad H_{SO} = \lambda_{SO} \hat{\psi}^\dagger \sigma_z \tau_z S_z \hat{\psi}$$

S_z Spin Operator im intrinsic Spin

- Bem:
- H_{SO} erhält die TR Symmetrie
 - H_{SO} ist einzig erlaubte Form der Inversion an der x - y Ebene d.h. $z \rightarrow -z$ erlaubt
 - H_{SO} öffnet ein gap $\rightarrow$ Isolator

Wir zeigen jetzt, daß H_{SO} natürlich folgt wenn wir einen TR-invarianten aber g_{SO} -öffnenden Term haben wollen.

alle Hamiltonians ΔH die mit H_0 kommutieren können kein g_{SO} öffnen $\Rightarrow$ suchen ΔH die mit H_0 antikommutieren.

$$H_0(\vec{k} + \delta\vec{b}) = \underline{\psi}^\dagger \begin{bmatrix} \underline{h}_\uparrow(\delta\vec{b}) & 0 \\ 0 & \underline{h}_\downarrow(\delta\vec{b}) \end{bmatrix} \underline{\psi}$$

mit

$$\underline{h}_\uparrow(\delta\vec{b}) = \underline{h}_\downarrow(\delta\vec{b}) = \delta k_x \sigma_x + \delta k_y \sigma_y$$

$$\Rightarrow \Delta H = D \sigma_z$$

D ist immer noch eine Matrix im Spinraum.

D ist eine 2×2 Matrix im Spinraum.

$$(i) \quad D = m \mathbb{1} \quad \text{bricht I-Symmetrie}$$

$$(ii) \quad D = S_z \quad ?$$

d.h.

$$(6.5) \quad \Delta H(\vec{k} + \delta\vec{b}) = S_z \sigma_z = \begin{bmatrix} \underline{\sigma}_z & 0 \\ 0 & -\underline{\sigma}_z \end{bmatrix} \quad \begin{matrix} \text{"}\uparrow\text{"} \\ \text{"}\downarrow\text{"} \end{matrix}$$

Nun wollen wir $\Delta H(\vec{k}' + \delta\vec{b})$ so konstruieren, daß der Gesamthamiltonian TR invariant ist!

da wir Teilchen mit echtem Spin haben

$$(6.6) \quad T = e^{-i\pi \hat{S}_y} K = -i \hat{S}_y K$$

$$T H_0(\vec{k} + \delta \vec{b}) T^{-1} = \begin{bmatrix} \underline{h}_\downarrow (\delta \vec{b})^* & 0 \\ 0 & \underline{h}_\uparrow (\delta \vec{b})^* \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \delta k_x \sigma_x - \delta k_y \sigma_y & 0 \\ 0 & \delta k_x \sigma_x - \delta k_y \sigma_y \end{bmatrix}$$

$$= H_0(\vec{k}' - \delta \vec{b}) = H_0(-\vec{k} - \delta \vec{b}) \quad \checkmark$$

$$\text{da } \vec{k}' = -\vec{k} + (\vec{b}_1 + \vec{b}_2)$$

Jetzt

$$T \Delta H(\vec{k} + \delta \vec{b}) T^{-1} = -S_z \sigma_z$$

$$\stackrel{!}{=} \Delta H(-\vec{k} - \delta \vec{b}) = \Delta H(\vec{k}' - \delta \vec{b})$$

$$\Rightarrow \Delta H(\vec{k}') = -S_z \sigma_z \quad \text{Vorzeichenwechsel bei } k \rightarrow k'$$

$$\text{d.h.} \quad \Delta H = \lambda_{so} \underline{\psi}^+ \sigma_z S_z \tau_z \underline{\psi}$$

□

Das Kane Mele Modell

$$H_0 = -i\hbar v_F \underline{\psi}^\dagger(\vec{r}) \left(\mathbb{1}_s \sigma_x \tau_z \partial_x + \mathbb{1}_s \sigma_y \partial_y \right) \underline{\psi}(\vec{r})$$

(6.7) $+ \lambda_{so} \underline{\psi}^\dagger(\vec{r}) (S_z \sigma_z \tau_z) \underline{\psi}(\vec{r})$

ist TR invariant aber hat eine endliche Bandlücke durch den Spin-Orbit Term

6.2 Kane-Mele Modell im Gitter

Jetzt wollen wir das vollständige Kane-Mele Modell, d.h. auch jenseits von $E \approx 0$ betrachten

$$(6.8) \quad H = t_1 \sum_{\langle ij \rangle} \hat{C}_{i\sigma}^\dagger \hat{C}_{j\sigma} + i\lambda_{so} \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} v_{ij} \hat{C}_{i\sigma}^\dagger S_{\sigma\sigma'}^z \hat{C}_{j\sigma'}$$

Graphene mit isotropen

Hüpfen für beide

Spin Komponenten

$\langle ij \rangle \hat{=} NN$

$\langle\langle ij \rangle\rangle \hat{=} NNN$

$v_{ij} = \pm 1$ Siehe Haldane Modell

In der Nähe von $E = 0$ reduziert sich (6.8) auf den kontinuierlichen Hamiltonian (6.7).

Man kann dieses Modell durch einen sogenannten Rashba - Spin-Orbit Term ergänzen

$$(6.9) \quad H_R = i\lambda_R \sum_{\langle ij \rangle} c_{i\sigma}^\dagger \left[(\vec{S} \times \vec{d}_{ij})_z \right]_{\sigma\sigma'} c_{j\sigma'}$$

wobei $\vec{d}_{ij}$ der Vektor von Gitterplatz i zu j bedeutet

In der Nähe von $E \approx 0$ und im Fourierraum ist

$$h_R(\vec{k} + \delta\vec{b}) = h_R(\vec{k}) = \epsilon_x S_y - \epsilon_y S_x \quad (6.10)$$

$$h_R(\vec{k}' + \delta\vec{b}) = h_R(\vec{k}') = -\epsilon_x S_y - \epsilon_y S_z$$

H_R alleine öffnet nicht die Bandlücke, d.h. $\lambda_{SO} \neq 0$ ist notwendig. Allerdings ist H_R TR invariant

Ein weiterer möglicher Zusatzterm ist ein Inversionssymmetrie brechender Term

$$(6.11) \quad H_I = \lambda_I \sum_j \epsilon_j \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j \quad \text{mit } \epsilon_j = \pm 1$$

auf A bzw B
Gitterplätzen

Damit ist die allgemeinste Form des Kane-Mele gegeben durch

$$H = t_1 \sum_{\langle ij \rangle} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j + i \lambda_{so} \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} v_{ij} c_{i\sigma}^\dagger (S^z)_{\sigma\sigma'} c_{j\sigma'}$$

(6.12)

$$+ i \lambda_R \sum_{\langle ij \rangle} \hat{c}_i^\dagger (\vec{S} \times \vec{d}_{ij})_z \hat{c}_j + \lambda_I \sum_j \varepsilon_j \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j$$

wobei Indizes für den internen Spin σ, σ' nur beim SO-Term explizit hingeschrieben wurden.

6.3. Eigenschaften des Kane-Mele Modells: Der Spin-Quanten-Hall-Effekt

jetzt Minimalmodell

$$\lambda_R = \lambda_I = 0$$

⇒ Spinkomponenten entkoppeln, d.h. wir haben zwei Kopien des Haldane Modells für $\sigma = \uparrow$ und $\sigma = \downarrow$ Elektronen

Spin $\uparrow$

$$\begin{aligned} \underline{h}(\vec{k} + \sigma \vec{b}) &= \sigma k_x \sigma_x + \sigma k_y \sigma_y + \lambda_{so} \sigma_z \\ \underline{h}(\vec{k}' + \sigma \vec{b}) &= -\sigma k_x \sigma_x + \sigma k_y \sigma_y - \lambda_{so} \sigma_z \end{aligned}$$

(6.13)

entspricht rotiertem Haldane Modell

$$\delta k_x \Big|_{\#} \rightarrow \delta k_y \quad \delta k_y \Big|_{\#} \rightarrow -\delta k_x$$

$$\frac{3}{2} t_1 \Big|_{\#} = -1 \quad m \Big|_{\#} = 0$$

$$-3\sqrt{3} t_2 \sin \phi = \lambda_{so}$$

$\Rightarrow$ topologisch nicht trivial für $\phi \neq 0, \pm\pi$

$$(6.14) \quad Ch_{\uparrow} = \begin{cases} 1 & \lambda_{so} > 0 \\ -1 & \lambda_{so} < 0 \end{cases}$$

Spin $\downarrow$

$$(6.15) \quad \underline{h}(\vec{k} + \delta \vec{b}) = \delta k_x \sigma_x + \delta k_y \sigma_y - \lambda_{so} \sigma_z$$

$$\underline{h}(\vec{k}' + \delta \vec{b}) = -\delta k_x \sigma_x + \delta k_y \sigma_y + \lambda_{so} \sigma_z$$

entspricht wieder rotiertem Haldane Modell jetzt aber

$$-3\sqrt{3} t_2 \sin \phi = -\lambda_{so}$$

$\Rightarrow$ topologisch nicht trivial für $\phi \neq 0, \pm\pi$

$$(6.16) \quad Ch_{\downarrow} = \begin{cases} -1 & \lambda_{so} > 0 \\ 1 & \lambda_{so} < 0 \end{cases}$$

Die Chern Zahl beider Spinkomponenten ist exakt entgegengesetzt. Die Gesamt-Chernzahl verschwindet

$$Ch = Ch_{\uparrow} + Ch_{\downarrow} = 0$$

Quanten-Spin-Hall-Effekt

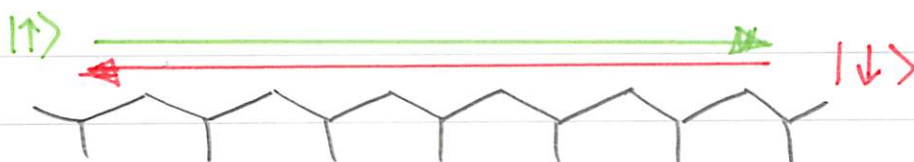
QSH-Effekt

Bem: (i) Die Separation in $\uparrow$ und $\downarrow$ gilt nicht mehr wenn eine Rashba Kopplung vorliegt.
In diesem Fall sind weder die totale Chernzahl noch die Chernzahlen der Spinkomponenten gute topologische Quantenzahlen!

$\Rightarrow$ brauchen eine neue topologische Quantenzahl!

(ii) An den Rändern eines QSH Isolators gibt es zwei Randmoden mit entgegengesetzter Chiralität

Für $\lambda_R = \lambda_I = 0$ entsprechen diese Spin-up ($\uparrow$) bzw Spin down ($\downarrow$) Elektronen



Falls es keine magnetische (TR-brechende)
Impurity gibt koppeln die entlanglaufenden
chiralen Randströme nicht miteinander (auch für $\lambda_R \neq 0$)

Die Existenz stabiler helikaler (chiral + antichiral)
Randmoden ist durch die Bandlücke und
die Zeitumkehrinvarianz geschützt