

$$\hat{H} = \underbrace{-\sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2}_{\hat{T}} + \underbrace{\sum_i V(\vec{r}_i)}_{\hat{V}} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|}}_{\hat{U}}$$

Skušamo reducirati na reševanje efektivnih enodimenzionalnih problemov s samoskladno določeni potenciali. Pričakujemo, da je to smiselno, če obstaja adiabatska povezava med osnovnim stanjem polnega problema in problema brez interakcije.

HARTREE FOCK: Nastavek je Slaterjeva determinanta modelčnih valovnih funkcij. Upošteva nelokalnost in zamenljivost fermionov.

Hartreejev člen: $\varphi_i(\vec{r}_i) V(\vec{r}_i) = \sum_{j \neq i} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} |\varphi_j(\vec{r}_j)|^2 d\vec{r}_j \cdot \varphi_i(\vec{r}_i)$

Izmenjalni člen: $-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \varphi_j^*(\vec{r}_j) \varphi_j(\vec{r}_i) \varphi_i(\vec{r}_i) d\vec{r}_j$

$V_x(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$ nelokalni potencial

Težava: HF je perturbativna metoda, čeprav Coulombova interakcija ni šibka.

$$r_s = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/3} \left(\frac{1}{N}\right)^{1/3} \frac{1}{a_B} \quad 1-5 \text{ v realnih materialih}$$

1. TEORIJA GOSTOTNIH FUNKCIONALOV

$\hat{T}$ in $\hat{U}$ vedno enaka, razlika samo v $\hat{V}$ ("zmenjen potencial"). Ideja: kaj če bi splošno "rešili" problem z $\hat{T} + \hat{U}$ in to uporabili za različne $\hat{V}$. ker ga ustvarjajo ioni

$$\hat{V} = \sum_{i=1}^N V(\vec{r}_i) = \int d\vec{r} V(\vec{r}) \hat{n}(\vec{r})$$

Hohenberg in Kohn (1960), Nobelova za kemijo (Kohn, Pople) 1998

Izrek 1: $V(\vec{r})$ je funkcional gostote elektrona $n(\vec{r})$.

Posledica: $\hat{H}$ je funkcional od n , ψ_{GS} je funkcional od n , pravzaprav vse lastnosti so funkcional od n .

Dokaz s kontradikcijo:

$|\psi\rangle$ naj bo osnovno stanje za $V(\vec{r})$

$|\psi'\rangle$ naj bo osnovno stanje za $V'(\vec{r})$

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \langle \psi' | \hat{H} | \psi' \rangle$$

Osnovno stanje naj bo nedegenerirano.

$$E' = \langle \psi' | \hat{H}' | \psi' \rangle < \langle \psi | \hat{H}' | \psi \rangle \quad \text{ker } \psi \text{ ni osnovno stanje za } \hat{H}' \quad (\text{variacijsko načelo})$$

$$E' < \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{H}' - \hat{H} | \psi \rangle$$

$$E' < E + \langle \psi | \hat{V}' - \hat{V} | \psi \rangle$$

Simetrično velja

$$E < E' + \langle \psi' | \hat{V} - \hat{V}' | \psi' \rangle$$

upoštevamo $\langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi' | \psi' \rangle$,
da se pokrajšata

Seštejemo in sledi $0 < 0$.

(Obstaja tudi bolj splošen dokaz za primer degeneriranega osnovnega stanja.)

Izrek 2: Energija osnovnega stanja je funkcional gostote, ki doseže minimum za pravo gostoto osnovnega stanja.

Dokaz: $n(\vec{r})$ določa $V(\vec{r})$, določa $|\psi_{GS}[n]\rangle$

$$E[n] \equiv \langle \psi_{GS}[n] | \hat{T} + \hat{U} | \psi_{GS}[n] \rangle + \int d\vec{r} V(\vec{r}) n(\vec{r})$$

Polem iz variacijskega načela sledi $E[n'] > E[n_{GS}]$, če $n' \neq n_{GS}$.

Celoten problem smo prevedli na minimizacijo ene same funkcije z enim brejeranim argumentom $\vec{r}$, ne valimo $\{\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N\}$.
Opazil je Dirac l. 1930 v kontekstu HF.

2. KOHN-SHAMOVE ENAČBE

(2.)

Funkcionala ne poznamo. Verjetno nekaj zelo zapletenega, neločalnega. Rešujemo uedomestni problem: vzamemo eno skalarno determinirano z modeliranimi valovnimi funkcijami $\varphi_i(\vec{r})$.

$$n(\vec{r}) = \sum_{i\sigma} |\varphi_i(\vec{r})|^2$$

$$E_{KS}^{[n]} = T_{aux}[n] + E_H[n] + E_{xc}[n] + \int d\vec{r} V(\vec{r})n(\vec{r})$$

$$T_{aux}[n] = \sum_{i\sigma} \langle \varphi_i | -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} | \varphi_i \rangle$$

$$E_H[n] = \frac{1}{2} \int d\vec{r} \int d\vec{r}' n(\vec{r}) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r} - \vec{r}'|} n(\vec{r}')$$

$E_{xc}[n]$ vsebuje vse prispevke k energiji onkraj Hartreejevega člena.

Vsebuje še del kinetične energije, ker smo jo izračunali za sistem neinteragirajočih delcev z enako gostoto $n(\vec{r})$. Tu torej sledimo vse, česar ne vemo točno.

$$E_{xc}[n] \equiv U[n] - E_H[n] + T[n] - T_{aux}[n]$$

xc = exchange + correlation. Korelacijski del je vse, kar je onkraj HF.

Če bi $E_{xc}[n]$ poznali točno, bi DFT dal točne rezultate.

LDA: približek lokalne gostote

$$E_{xc}^{LDA}[n] = \int d\vec{r} n(\vec{r}) E_{xc}[n(\vec{r})]$$

Uporabimo izmenjabelno in korelacijsko energijo izračunano za homogeno gostoto elektronov n . (Rečimo z metodami QMC.)

GGA: posplošeni gradientni približek

$$E_{xc} = E_{xc}[n(\vec{r}), \nabla n(\vec{r})]$$

LSDA: približek lokalne spinske gostote

$$E = E[n_\uparrow, n_\downarrow]$$

Za probleme v magnetizmu.

Minimiziramo $E[u]$ po modeliranih orbitalah.

Vpeljemo veži ϵ_i , da bodo orbitale norumirane, $\epsilon_i (\langle \varphi_i | \varphi_i \rangle - 1)$.

$$\frac{\delta E[u]}{\delta \varphi_i^*} = \frac{\delta E[u]}{\delta u(\vec{r})} \frac{\delta u(\vec{r})}{\delta \varphi_i^*} = \frac{\delta E[u]}{\delta u(\vec{r})} \varphi_i$$

$$\text{KS: } \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) + V_{xc}(\vec{r}) \right] \varphi_i(\vec{r}) = \epsilon_i \varphi_i(\vec{r})$$

$$V_H(\vec{r}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d\vec{r}' \frac{u(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad V_{xc}(\vec{r}) = \frac{\delta E_{xc}[u]}{\delta u(\vec{r})} \quad (\text{variacijski odvod})$$

UPORABA :

Najbolj popularna ab-initio metoda, "standardna metoda"

- idealna za lastnosti osnovnega stanja, manj za vzburitve in odziv
- določanje strukture
- udrežijska energija, elastične konstante
- določanje Fermijevega nivoja
- približek za disperzijske zveže, valne funkcije, DOS^{gostota stanj}
- foton, e-ph sklopilnik

Nc deluje dobro za:

- energijska reža v polprevodnikih (premajhna)
- močno korelirane probleme, 3d, 4f, 5f, lokalizirane orbitale
- eksotična stanja

Dodatna kžava: velik izbor predlaganih funkcionalov,
različni "primeri" za različne probleme, ni univerzalnosti.

3. SKLOPTEV SPIN-TIR

3.

relativistični popravek:

$$H_{SO} = \frac{\hbar}{4m_e c^2} \vec{\sigma} \cdot (\nabla V \times \vec{p}) \rightarrow \text{spin se odziva na tirno gibanje elektrona}$$

Glavna učinka:

- spinski razcep v odsotnosti polja v kristalih brez centra inverzije
- velika gajstkov Zeemanovega razcepa

Valorne funkcije so zdaj spinorji.

DVOJNE GRUPE: Schöenflies G'

Nov simetrijski element: $\mathcal{R}$, zasuka za kot 2π , $\psi \rightarrow -\psi$.

Komutira z drugimi elementi $\Rightarrow$ veljast grupe se podvigi.

Več razredov, vendar ne 2x toliko.

$$\left[\begin{array}{l} \text{Blochova stanja: } \psi_{nk}^+ = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_{nk}^+(\vec{r}) \alpha \\ \psi_{nk}^- = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_{nk}^-(\vec{r}) \beta \end{array} \right] \quad \left. \begin{array}{l} \psi_{nk} = a \psi_{nk}^+ + b \psi_{nk}^- \\ a = a_{nk} \quad b = b_{nk} \end{array} \right\}$$

$\Gamma_1 \otimes D_{1/2}$ induc. rep. spinske valorne funkcije $\equiv$ spinor

$\uparrow$ induc. rep. prostorske valorne funkcije

$$X_j(\alpha) = \frac{\sin(j+1/2)\alpha}{\sin(\alpha/2)} \quad \text{za } j=1/2 \quad X_{1/2}(\alpha) = \frac{\sin \alpha}{\sin(\alpha/2)} = 2 \cos(\alpha/2)$$

α	$X_{1/2}(\alpha)$	$X_{1/2}(2\alpha)$
$\bar{E}$ 0	$\frac{2}{2/2} = 2$	-2
C_2 π	0	0
C_4 $\frac{\pi}{2}$	$\frac{\sin \pi/2}{\sin \pi/4} = \frac{1}{1/\sqrt{2}} = \sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$
C_3 $\frac{\pi}{3}$	$\frac{\sin 2\pi/3}{\sin \pi/3} = \frac{\sqrt{3}/2}{\sqrt{3}/2} = 1$	-1

Velja:

$$X_j(\alpha + 2\pi) = (-1)^{2j} X_j(\alpha)$$

$$2j \text{ lih: } X_j(\pi) = X_j(\pi + 2\pi) = 0 \Rightarrow C_2 \text{ posebno}$$

Splošno: $X(2\pi) = -X(0)$

Vsaka induc. rep. originalne grupe je tudi ireduc. rep. dvojne grupe, z istimi karakterji, $\chi(2C_4) = \chi(C_4)$. Dodatne uore upodobljene, s spreminjanjem predznaka ob $\mathcal{R}$.

$$\bar{0} = 0 \mathcal{R} \quad C_n^{2n} = E \quad C_n^n = \bar{E} \quad C_n^{-1} = C_n^{2n-1} = \bar{E} C_n^{n-1} \Rightarrow C_2^{-1} = \bar{C}_2 \text{ PAZI!}$$

$$\sigma = 1C_2 \Rightarrow \sigma^{-1} = \bar{\sigma} \leftarrow \sigma^2 = \bar{E} \text{ PAZI!} \quad S_4 = 1\bar{C}_4^{-1} \quad S_3 = 1\bar{C}_6^{-1} \quad S_6 = 1\bar{C}_3^{-1}$$

DVOJNE PROSTORSKE GRUPE: rotacije popravimo tako, da se zanka tudi spušči del valovne funkcije.

Ugotovimo lahko, kako so odpravi degeneracijo nivojev; glavnimi učinek trije v simetrijskih točkah BZ.

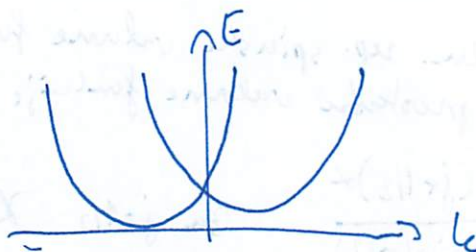
Primer: Ge, vli valenčnega pasu $\Gamma'_{25} \times D^{(1/2)} = \Gamma_8^+ + \Gamma_7^-$

$$\Delta_{SO} = 0,29 \text{ eV}$$

SOC lahko odpre kalotne energijske reže, ki sicer ne bi obstajale (zaradi spinske degeneracije). Pomembno pri nekaterih topoloških izolatorjih (tistih z inverzijo).

RASHBOW POJAV: Ustvari brez centra inverzije, električno polje $\perp$ na ravino ustvari gradient. Nastane efektivno magnetno polje, ki deluje različno na elektrone s spinom $\uparrow$ in $\downarrow$.

$$H_R = \alpha_R (\vec{k} \times \hat{e}_z) \cdot \vec{\sigma}$$



Do TU, 12.3.2024

4. TOPOLOŠKE FAZE

485

////// prevodni

Teorija pasov stana skoraj 100 let
(Alan Hennes Wilson, 1931).

//////// valenčni

Pasovna struktura je preslikava iz 1.BZ (vsi neekvivalentni $\vec{k}$) v prostor vseh valenčnih funkcij, $\vec{k} \rightarrow \psi_{\vec{k}}(\vec{r})$.

Ali obstajajo topološko različne preslikave? (Različni derivacijski razredi glede na gladke deformacije.)

Primer v 1D: $e^{i\theta} \rightarrow e^{i\theta(0)}$ iz S^1 na S^1 .

Ovojno število $\in \mathbb{Z}$. Preslikav v različnih razredih ne moremo zvezno (gladko) deformirati med seboj.

Takšna topološka števila lahko definiramo za različne dimenzije.

Če zvezno spreminjamo $\hat{H}$, se topološka števila ne morejo spremeniti.

(spremenimo)
To je možno samo, če ta količina ni dobro definirana, če ni energijske vrzeli med pasovi, ko sistem postane kovina.

TOPOLOŠKA FAZA: Vsa stanja z gapom, ki jih lahko prežemo z gladkimi spremembami $\hat{H}$ (gap ves čas obstaja).

Šteli med invariancama lahko opišemo kot krajeno odvisen $\hat{H}(x)$.

Če je topološka invarianta na obeh straneh različna, potem mora biti pri do štela med pasovi $\Rightarrow$ prevodno valno stanje.
(Vakuum smatramo kot topološko trivialno fazo.)

SIMETRIJSKO ZAŠČITENA TOPOLOŠKA FAZA: Vsa stanja z gapom, ki jih lahko prežemo z gladkimi spremembami $\hat{H}$, ne da bi pri tem zlomili simetrijo.

Bistvena je simetrija na obeh straneh. V 3D ni topološko nekihvalnih faz po splošni definiciji, obstajajo pa sistemi, ki jih ne moremo deformirati v trivialno, ne da bi pri tem zlomili simetrijo na obeh straneh. To so "topološki izolatorji".

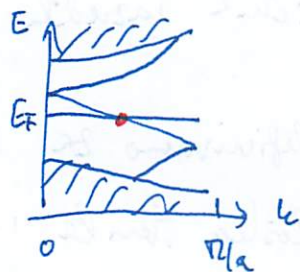
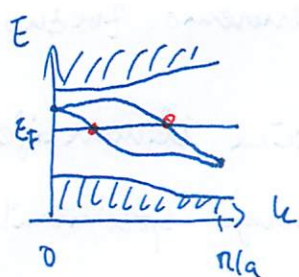
Tradicionalno (Landau) smo stanja opredeljevali preko spontano zlomljenih simetrij. Topološke faze imajo lahko isto simetrijo, a so vseeno različne. Rečemo, da so TOPOLOŠKO UREDENE. To pomeni, da obstaja neka globalna lastnost.

Imajo lahko kvantizirane lastnosti (ščitilo valnih stanj, transportne lastnosti). Imajo lahko degenerirana osnovna stanja.

↳ topološki kvantni računalniki

2.2 TOPOLOŠKI IZOLATORJI

Simetrija $T = e^{i\pi S_y / \hbar} K$



Risemo valna stanja.

2D, obratimo vzdolž neke smeri, gledamo moment k v tej smeri.

$$H_{\vec{k}} = e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} H e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

$$H_{\vec{k}} |u_{n\vec{k}}\rangle = E_{n\vec{k}} |u_{n\vec{k}}\rangle$$

$$T H_{\vec{k}} T^{-1} = H_{-\vec{k}}$$

Če $-\vec{k} = \vec{k} + \vec{G}$, potem $T H_{\vec{k}} T^{-1} = H_{\vec{k}} \Rightarrow$ TRIM (time-reversal invariant momenta)

$$2 \text{ v } 1D, 4 \text{ v } 2D, 8 \text{ v } 3D$$

(Če prisotna inverzija, $I \times T$ preobrazi $\vec{k}$ v $-\vec{k}$, antiunitarni operator, zato 2x degeneracija v vseh točkah ~~BRE~~ tudi v prisotnosti SOC. Bolj zanimiv torej primer brez inverzije!)

V $k=0$ in $k=\pi/a$ imajna 2x degeneracija. SOC razcepi stanja. Točki $k=0$ in $k=\pi/a$ sta lahko povezani v parit stanj. Relna stanja lahko odpravimo. Druga možnost pa je taka, da realna stanja morajo obstajati.

$$W_{mn}(\vec{k}) = \langle u_m(\vec{k}) | T | u_n(\vec{k}) \rangle \quad \text{mim po vseh zasedenih stanjih}$$

W antisimetrična v TRIM točkah Λ .

$$\delta_a = \frac{\prod_{\vec{k} \in \Lambda} W(\vec{k})}{\sqrt{\det W(\Lambda)}} = \pm 1$$

$$(-1)^V = \prod_a \delta_a$$

4. TOPOLOŠKI IZOLATORJI (predstaviš v letu 2024)

(4.)

Model SSH (Su-Schrieffer-Hegger): Vredna atomov tip A in B

$$\hat{H} = v \sum_{m=1}^N (|m, B\rangle \langle m, A| + \text{H.c.}) + w \sum_{m=1}^{N-1} (|m+1, A\rangle \langle m, B| + \text{H.c.})$$

zunanji celice

med celicami

$$v, w \in \mathbb{R} \quad v, w \geq 0$$

$$|m, \alpha\rangle \rightarrow |m\rangle \otimes |\alpha\rangle \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{matrix} A & B \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{H} = v \sum_{m=1}^N |m\rangle \langle m| \otimes \hat{\sigma}_x + w \sum_{m=1}^{N-1} (|m+1\rangle \langle m| \otimes \frac{\hat{\sigma}_x + i\hat{\sigma}_y}{2} + \text{H.c.})$$

V uhomajosti (bulk): p.r.p.

$$\hat{H}_{\text{bulk}} = \sum_{m=1}^N (v |m, B\rangle \langle m, A| + w |(m \bmod N)+1, A\rangle \langle m, B| + \text{H.c.})$$

$$|\psi_n(k)\rangle = |k\rangle \otimes |u_n(k)\rangle \quad |k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{m=1}^N e^{imk} |m\rangle$$

$$|u_n(k)\rangle = a_n(k) |A\rangle + b_n(k) |B\rangle$$

Hamiltonian v prostoru gibalnih količin:

$$\hat{H}(k) = \langle k | \hat{H}_{\text{bulk}} | k \rangle = \sum_{\alpha\beta} |\alpha\rangle \langle k, \alpha | \hat{H}_{\text{bulk}} | k, \beta \rangle \langle \beta |$$

$$\hat{H}(k) = \begin{pmatrix} 0 & v + w e^{-ik} \\ v + w e^{ik} & 0 \end{pmatrix} \quad \text{TRICK: } H(k)^2 = \begin{bmatrix} |v + w e^{-ik}|^2 & 0 \\ 0 & |v + w e^{ik}|^2 \end{bmatrix}$$

$$\text{Gap: } \Delta = \min_k E(k) = |v - w|$$

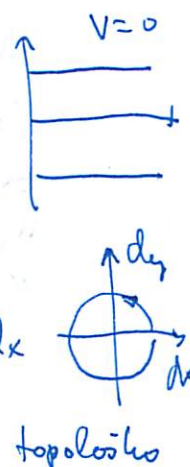
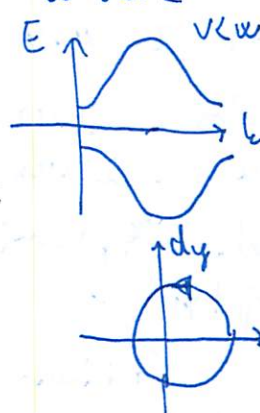
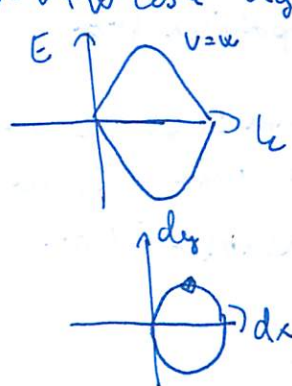
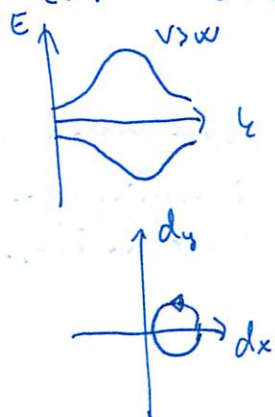
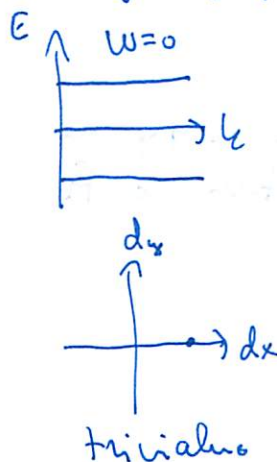
$$E(k) = \pm |v + w e^{ik}|$$

→ SEMINAR!

Če polzaporedjen, Levinov za $v=w$, sicer izolator. Peierlova nestabilnost!

$$\text{Drugačen zapis: } \hat{H}(k) = d_0(k) \hat{\sigma}_0 + \vec{d}(k) \cdot \vec{\sigma} = d_0(k) \hat{\sigma}_0 + d_x(k) \hat{\sigma}_x + d_y(k) \hat{\sigma}_y + d_z(k) \hat{\sigma}_z$$

$$\text{Torej } d_0(k) = d_z(k) = 0 \quad d_x(k) = v + w \cos k \quad d_y(k) = w \sin k$$



Robna stanja

Popolna dimerizacija: $v=1, w=0$ oz $v=0, w=1$
trivialno topološko

V topološkem primeru imamo robni stanja pri $E=0$.

Pri $v \neq 0$ imajo levičarji "širino". Energija je $E = e^{-N/\xi}$ $\xi = \frac{1}{\ln(v/w)}$

Kiralna simetrija = podmrežna simetrija

$\Gamma H \Gamma^\dagger = -H$ Unitaren in Hermitski, $\Gamma^\dagger \Gamma = \Gamma^2 = 11$ Antikomutira s Hamiltonianom!

Lokalno: $\hat{\Gamma} = \hat{\gamma} \oplus \hat{\gamma} \oplus \dots \oplus \hat{\gamma} = \bigoplus_{n=1}^N \hat{\gamma}$

$$P_A = \frac{1}{2}(11 + \Gamma) \quad P_B = \frac{1}{2}(11 - \Gamma) \quad P_A + P_B = 11 \quad P_A P_B = \frac{1}{4}(11 + \Gamma - \Gamma - \Gamma^2) = 0$$

Ni prehoda med mesti iste podmreže:

$$P_A H P_A = P_B H P_B = 0 \quad H = P_A H P_B + P_B H P_A$$

Velja $\hat{\Gamma} = \hat{P}_A - \hat{P}_B$
(možna definicija $\hat{\Gamma}$)

Spekter je simetričen:

$$H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle \Rightarrow H\Gamma|\psi_n\rangle = -\Gamma H|\psi_n\rangle = -\Gamma E_n|\psi_n\rangle = -E_n\Gamma|\psi_n\rangle$$

σ_z člen v $\hat{H}$ ni dovoljen, ker predstavlja člene na isti podmreži.

$\Rightarrow$ kiralna simetrija zmanjša dimenzionalnost parameterskega prostora Hamiltoniana.

Ko gre k od 0 do 2π , vektor $\vec{d}$ opiše nekoli pot v ravnini (dx, dy).

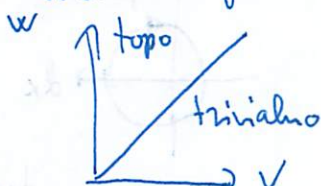
Ovrgno skribo: kolikokrat gre okoli izhodišča.

$$\text{če } H(k) = \begin{pmatrix} 0 & h(k) \\ h^*(k) & 0 \end{pmatrix} \quad \nu = \frac{1}{2\pi i} \int_{-n}^n dk \frac{d}{dk} \log h(k)$$

$\nu = 0$ za $v > w$ trivialna faza

$\nu = 1$ za $w > v$ topološka faza

Topološka invarianta: se ne more spremeniti, če se gap ne zapre in če ves čas velja kiralna simetrija, medtem ko $\hat{H}$ "mehko" spreminjamo (adiabatska deformacija).



(5.)

Uzospredelna med robom in notranjostjo:

ν je enako število stanj na levem robu ($N_A - N_B$) v energijskem delu $-\varepsilon < E < \varepsilon$.

Večina stanj z energijo 0 tudi na domenskih skalah med trizialno in topološko fazo.

Funkcionalizacija robov: dve domenski skali, dve lokalizirani stanji z disipativnimi reži, ki se malo prelivajo $\rightarrow$ bonding in anti-bonding stanji. Samo bonding stanje zasedeno z 1 el. Pol elektrona na dmočja vsake domenske skale. (Solitoni)

2D topološki izolatorji

QHE, brez TRI, Chernovo število, kiralna robna stanja (enasmer)
 QSHE, z TRI, $\mathbb{Z}_2$ invarianta, helična robna stanja (smer odvisna od spina)

3D topološki izolatorji

Površinska stanja z disperzijo Diracovega sločca.
 Štiri $\mathbb{Z}_2$ invariante. TRI simetrija.

Weylove in Diracove polkovine

Prevodni in valenčni pas se dotikata v določenih točkah BZ.
 Posebnost so Fermijevi loki na površini, namesto zaključenih zank.

5. DINAMIKA ELEKTRONOV V KRISTALU

6.

Zanimajo nas ~~reperi~~periodične ureditve zaradi zunanjih polj ali zaradi defektov v kristalu.

$$[\hat{H}_0 + U(\vec{r})]\psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t}$$

$\hat{H}_0$ ZUNANJI POTENCIAL (EH POLJE ali NEČISTOTA), učinki kristala v $\hat{H}_0$
 $U(\vec{r})$ se spreminja počasi (na skali medatomskih razdalj), lahko pa postane velika za $\vec{r} \rightarrow \infty$. Homogeno polje: $U(\vec{r}) = q\vec{E} \cdot \vec{r}$, divergira.

- a) $[\nabla U(\vec{r})] \cdot \vec{d} \ll$ pasovna širina, $|\vec{d}|$ je medatomska razdalja
 b) če časovno odvisen $U(\vec{r}, t)$, $\hbar\omega \ll$ razlike med pasovoma
- za kvantno dinamiko
 ali, za polprevodnike
 pa lahko ni ok

WANNIEROVE FUNKCIJE

$$w_n(\vec{r} - \vec{R}_j) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} \phi_{n\vec{k}}(\vec{r})$$

Blochove funkcije morajo biti gladke in periodične po $\vec{k}$.

Lahko vključimo poljubni fazi faktor $e^{i\theta_j}$ in uveljavimo lokalizacijo v realnem prostoru. Koncept MLWF.

Velja: 1) $\phi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} w_n(\vec{r} - \vec{R}_j)$

2) $\langle w_n(\vec{R}_j) | w_n(\vec{R}_{j'}) \rangle = \delta_{nn'} \delta_{jj'}$

3) $w_n(\vec{r} - \vec{R}_j)$ lokalizirana okoli $\vec{R}_j$
 zato uporabna za vizualizacijo paritetne udarja, polarizacije, vezavnih lastnosti, ipd.

Uporabna baza za konstrukcijo Hamiltonianov v približni tesni vezi, kot na podlagi rezultatov ab-initio izračunov.

Vektor stanja v različnih bazah

$$\begin{aligned}
 |\psi(t)\rangle &= \left(\int d\vec{r} |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| \right) |\psi(t)\rangle = \int d\vec{r} \psi(\vec{r}, t) |\vec{r}\rangle \\
 &= \left(\sum_{u\vec{r}_i} |\phi_{u\vec{r}_i}\rangle \langle \phi_{u\vec{r}_i}| \right) |\psi(t)\rangle = \sum_{u\vec{r}_i} \psi_u(\vec{r}_i, t) |\phi_{u\vec{r}_i}\rangle \\
 &= \left(\sum_{u\vec{r}_j} |\omega_u(\vec{r}_j)\rangle \langle \omega_u(\vec{r}_j)| \right) |\psi(t)\rangle = \sum_{u\vec{r}_j} \psi_u(\vec{r}_j, t) |\omega_u(\vec{r}_j)\rangle
 \end{aligned}$$

Če je polje šibko, bo elektron ostal v istem pasu (adiabatski približek).
Naj bo to pas u .

$$|\psi(t)\rangle = \sum_j \psi_u(\vec{r}_j, t) |\omega_u(\vec{r}_j)\rangle \Rightarrow \psi(\vec{r}, t) = \sum_j \psi_u(\vec{r}_j, t) \omega_u(\vec{r} - \vec{r}_j)$$

↑
ovojnica, opisuje vso dinamiko

$$\hat{U} |\phi_{u\vec{r}_i}\rangle = \vec{r}_i |\phi_{u\vec{r}_i}\rangle \quad \hat{R} |\omega_u(\vec{r}_j)\rangle = \vec{r}_j |\omega_u(\vec{r}_j)\rangle$$

$$[\hat{R}, \hat{U}] = i \quad \hat{R} = i \frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} \quad \hat{U} = -i \frac{\partial}{\partial \vec{r}_j} \quad (\hat{U} \text{ in } \hat{R} \text{ v smislu definirana na diskretnem naboru točk})$$

Približek:

$$\begin{aligned}
 \hat{U} |\omega(\vec{r}_j)\rangle &= \hat{U} \left(\int d\vec{r} |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| \right) |\omega(\vec{r}_j)\rangle = \int d\vec{r} U(\vec{r}) |\vec{r}\rangle \langle \vec{r} | \omega(\vec{r}_j)\rangle \\
 &\approx U(\vec{r}_j) \int d\vec{r} |\vec{r}\rangle \langle \vec{r} | \omega(\vec{r}_j)\rangle = U(\vec{r}_j) |\omega(\vec{r}_j)\rangle
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_0 |\psi\rangle &= \hat{H}_0 \left(\sum_{u\vec{r}_i} |\phi_{u\vec{r}_i}\rangle \langle \phi_{u\vec{r}_i}| \right) |\psi\rangle = \sum_{u\vec{r}_i} E_u(\vec{r}_i) |\phi_{u\vec{r}_i}\rangle \langle \phi_{u\vec{r}_i} | \psi \rangle \\
 &= \sum_{\vec{r}_j} E_u(-i \frac{\partial}{\partial \vec{r}_j}) |\omega_u(\vec{r}_j)\rangle \underbrace{\langle \omega_u(\vec{r}_j) | \psi \rangle}_{\psi_u(\vec{r}_j, t)}
 \end{aligned}$$

različni delci!

$$\sum_{\vec{r}_j} \left[E_u(-i \frac{\partial}{\partial \vec{r}_j}) + U(\vec{r}_j) \right] \psi_u(\vec{r}_j, t) |\omega_u(\vec{r}_j)\rangle = i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_{\vec{r}_j} \psi_u(\vec{r}_j, t) |\omega_u(\vec{r}_j)\rangle$$

velja v vsaki točki: $\left[E_u(-i \frac{\partial}{\partial \vec{r}}) + U(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}, t) = i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t)$

$$H_{\text{eff}} = E_u(-i \frac{\partial}{\partial \vec{r}}) + U(\vec{r})$$

Wannierova reprezentacija

$$H_{\text{eff}} = E_u(\vec{k}) + U(i \frac{\partial}{\partial \vec{k}})$$

Blochova reprezentacija

NEČISTOČE:

$$U = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \frac{e^2}{r}$$

$$E_c(k) = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon r} \right] \psi(\vec{r}) = (E - E_g) \psi(\vec{r})$$

$$\text{nivoji} \propto \frac{m^*}{m} \frac{1}{\epsilon^2} \rightarrow \frac{1}{710} \text{ radij, } \epsilon \frac{m}{m^*} \rightarrow 60 \text{ (za silicij)}$$

ZUNANJE POLJE:

$$\text{Heisenbergova enačba} \quad \frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [A, H]$$

$$i\hbar \frac{d\vec{r}}{dt} = [\vec{r}, H_{\text{eff}}]$$

$$= [\vec{r}, E_n(-i\frac{\partial}{\partial \vec{r}}) + U(\vec{r})]$$

$$= [\vec{r}, E_n(-i\frac{\partial}{\partial \vec{r}})]$$

$$= [i\frac{\partial}{\partial \vec{r}}, E_n(\vec{r})] = i\frac{\partial}{\partial \vec{r}} E_n(\vec{r}) - E_n(\vec{r}) i\frac{\partial}{\partial \vec{r}}$$

(dokaz z testno funkcijo)

$$= i \left(\frac{\partial}{\partial \vec{r}} E_n(\vec{r}) \right)$$

$$\text{Torej } \vec{v} = \frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{1}{\hbar} (\nabla_{\vec{r}} E_n(\vec{r}))$$

$$i\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = [\vec{k}, H_{\text{eff}}]$$

$$= [\vec{k}, U(i\frac{\partial}{\partial \vec{r}})]$$

$$= [-i\frac{\partial}{\partial \vec{r}}, U(\vec{r})]$$

$$= -i (\nabla_{\vec{r}} U(\vec{r}))$$

$$\text{Torej } \hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -\nabla_{\vec{r}} U(\vec{r}) = \vec{F}$$

Dругačen pristop: $E_n(-i\frac{\partial}{\partial \vec{r}}) + U(\vec{r}) \Rightarrow E_n(\frac{\vec{p}}{\hbar}) + U(\vec{r})$ in obravnavamo kot klasični Hamiltonian

Valovni paketi se obnašajo kot klasični točkasti delci.

$$a \ll (\hbar k)^{-1} \quad \Delta r \ll |\vec{r}|^{-1}$$

↑ skala spremembe potenciala

$$\left. \begin{matrix} gE_a \\ \hbar\omega_c \end{matrix} \right\} \ll \frac{\Delta^2}{\epsilon\hbar}$$

da ni prehodov med pasovi

6. BLOCHOVE OSCILACIJE

$$\vec{F} = \text{konst.} \Rightarrow \vec{k}(t) = \vec{k}(0) + \frac{\vec{F}}{\hbar} t \Rightarrow \vec{k}(t) = \frac{2Et}{\hbar} \hat{x} \quad \text{za} \quad \vec{E} = E \hat{x}$$

$$\hbar v_x = \frac{\partial E_n}{\partial k_x} \quad x(t) = \int_0^t v_x(t) dt = \int_0^t \frac{dt}{\hbar} \frac{\partial E_n}{\partial k_x} = \int_0^t \underbrace{\frac{dt}{\hbar \frac{\partial k_x}{\partial E_n}}}_{1/gE} \frac{\partial E_n}{\partial k_x} dk_x = \frac{1}{2E} [E_n(k_x(t)) - E_n(k_x(0))]$$

Uo valarni vektor doseže vred BZ, doživi Braggar odboj. Gibanje v realnem prostoru je periodično. Tož ne teče.

Ta Blochove oscilacije so vidne samo, če v višnjem črni ne pride do sipanja na nečistočah ali vzburitvah.

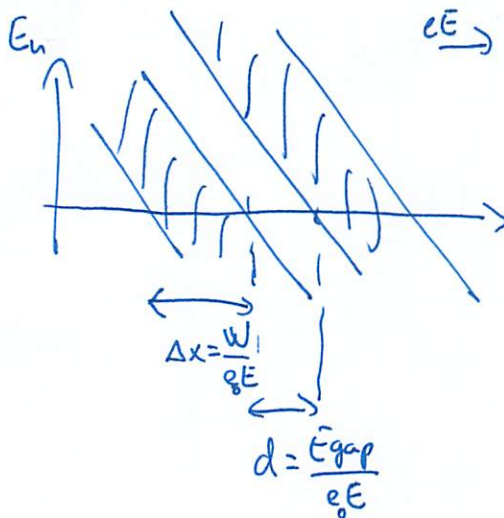
Pot v pol periode: $\Delta x = \frac{W}{eE} \leftarrow$ širina pasu

Za $E \sim \frac{V}{\text{mm}}$, $W \sim \text{eV} \Rightarrow \Delta x \sim \text{nm}$. Proste poti so $\sim 10 \text{ nm}$. Ni vidno v običajnih kerinah.

7. ZENERJEV PREBOJ

Če se $U(\vec{r})$ spreminja hitro, uporabimo matrične elemente $\langle \psi_n(\vec{r}_j) | U(\vec{r}) | \psi_m(\vec{r}_j) \rangle$

Marder, parabolčna pasova, m^* reducirana masa:



$$P = \exp \left[-\frac{2}{3} \frac{E_{\text{gap}}^{3/2}}{e_0 E} \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2}} \right]$$

$$P = \exp \left[-\frac{\pi^2}{4} \frac{E_{\text{gap}}^2}{E^0 e_0 E a} \right]$$

$$E^0 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{2} G \right)^2$$

Pri še večjem polju pride do plazmenga preboja: elektron parizira nastane par elektron-vzel.

Zener diode se uporablja kot referenca za napetost.

8. ANOMALNA HITROST

(8.)

Obravnavamo Blochove funkcije $\psi_{u\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{u\vec{k}}(\vec{r})$.

Periodični del $u_{u\vec{k}}(\vec{r})$ je periodičen tako v realnem kot v recipročnem prostoru. Zanimajo nas lokalne in globalne lastnosti $u_{u\vec{k}}$ v $\vec{k}$ prostoru.

$$H |\psi_{u\vec{k}}\rangle = E_{u\vec{k}} |\psi_{u\vec{k}}\rangle$$

$$H e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} |u_{u\vec{k}}\rangle = E_{u\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} |u_{u\vec{k}}\rangle$$

$$\text{Vpeljemo } H(\vec{k}) = e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \hat{H} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \Rightarrow H(\vec{k}) |u_{u\vec{k}}\rangle = E_{u\vec{k}} |u_{u\vec{k}}\rangle$$

$$H_{\vec{k}} \equiv H(\vec{k}) = \frac{(\hat{p} + \hbar\vec{k})^2}{2m} + u(\vec{r})$$

$$\text{Vprašanje faz: } |\psi_{u,\vec{k}+\vec{G}}\rangle = e^{i\gamma(\vec{k})} |\psi_{u,\vec{k}}\rangle$$

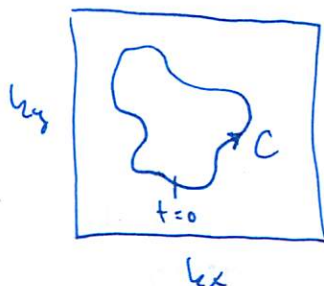
$$\text{Periodična umrežitev: } |\psi_{u,\vec{k}+\vec{G}}\rangle = |\psi_{u,\vec{k}}\rangle \Rightarrow u_{u,\vec{k}+\vec{G}}(\vec{r}) = e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}} u_{u,\vec{k}}(\vec{r})$$

$$\hat{O} \rightarrow \hat{O}_{\vec{k}} = e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \hat{O} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad \langle \hat{O} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{u\vec{k}} \langle \psi_{u\vec{k}} | \hat{O} | \psi_{u\vec{k}} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{u\vec{k}} \langle u_{u\vec{k}} | \hat{O}_{\vec{k}} | u_{u\vec{k}} \rangle$$

$$\text{Primer: } \vec{v} = -\frac{i}{\hbar} [\vec{r}, H] \Rightarrow v_{\vec{k}} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} H_{\vec{k}}$$

Ukrožna sprememba (adiabatska, ostanemo v istem pasu):

$$|\phi(t=0)\rangle = |u_{u\vec{k}}(0)\rangle$$



$$H(\vec{k}(t)) |\phi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\phi(t)\rangle$$

$$|\phi(t)\rangle = e^{-i\hbar \int_0^t dt' E_{u\vec{k}}(\vec{k}(t'))} \underbrace{e^{i\gamma_u(t)}}_{\text{geometrijska faza}} |u_{u\vec{k}}(t)\rangle$$

$$\gamma_u(t) = \int_{\vec{k}(0)}^{\vec{k}(t)} d\vec{k} \cdot \vec{A}_u(\vec{k})$$

$$\vec{A}_u(\vec{k}) = i \langle u_{u\vec{k}} | \nabla_{\vec{k}} u_{u\vec{k}} \rangle = -\text{Im} \langle u_{u\vec{k}} | \nabla_{\vec{k}} u_{u\vec{k}} \rangle$$

Berryjev potencial (realna kodirana)

$$\text{Berryjeva ukrivljenost: } \vec{\Omega}_u(\vec{k}) = \nabla_{\vec{k}} \times \vec{A}_u(\vec{k})$$

Geometrijska faza po spremembi po zaprti poti:

$$\gamma_n = \oint d\vec{\ell} \cdot \vec{A}_n(\vec{\ell}) = \int d\vec{S} \cdot \vec{\Omega}_n(\vec{\ell}) \quad \text{Stokesov izrek}$$

Umetvena transformacija:

$$|\tilde{u}_n\rangle = e^{-i\beta(\vec{\ell})} |u_n\rangle$$

$$\tilde{A}_n(\vec{\ell}) = \vec{A}_n(\vec{\ell}) + \nabla_{\vec{\ell}} \beta(\vec{\ell})$$

$$\tilde{\Omega}_n(\vec{\ell}) = \vec{\Omega}_n(\vec{\ell}) \quad \text{invariantna količina}$$

Druge definicija: $\Omega_{n,\mu\nu}(\vec{\ell}) = -2 \operatorname{Im} \langle \partial_\mu u_n | \partial_\nu u_n \rangle$

Fizični izvor: adiabatski približek nas omeji na gibanje znotraj enega pasu. Berryjeva ukrivljenost je torej posledica vpliva vseh drugih pasov.

$$\vec{\Omega}_n = i \sum_{m \neq n} \frac{\langle n | \nabla H | m \rangle \times \langle m | \nabla H | n \rangle}{(E_m - E_n)^2} \quad \leftarrow \text{DOKAZ: Seminarska!}$$

Valovni paket:

$$\begin{aligned} \phi_{\vec{k}, \vec{\ell}}(\vec{r}) &\equiv \int \frac{d\vec{\ell}}{(2\pi)^3} e^{-\frac{|\vec{\ell} - \vec{k}|^2}{2\sigma k^2}} e^{-i\vec{\ell} \cdot \vec{r}} \underbrace{\psi_{u_n}(\vec{r})}_{\hookrightarrow e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_n(\vec{r})} \\ &\equiv u_n(\vec{r}) \int \frac{d^3 \vec{\ell}}{(2\pi)^3} e^{-\frac{|\vec{\ell} - \vec{k}|^2}{2\sigma k^2}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{\ell})} \\ &\quad \underbrace{e^{-\frac{\sigma k^2}{2} |\vec{r} - \vec{\ell}|^2}}_{e^{-\frac{\sigma k^2}{2} |\vec{r} - \vec{\ell}|^2}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{\ell})} \\ &= \psi_{u_n}(\vec{r}) e^{-\frac{\sigma k^2}{2} |\vec{r} - \vec{\ell}|^2} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \end{aligned}$$

"kine shifting": premik se prevede v množenje z eksponentnim faktorjem

To je valovni paket, ki predstavlja (semi)klasičen delec z lego $\vec{k}$, kristalnim momentom $\vec{\ell}$ in energijo $E_n(\vec{\ell})$.

Priznajte, da ima $u_n(\vec{r})$ enako fazo za vse $\vec{\ell}$, ki tvorijo valovni paket, kar se zdi smiselno, saj se^{uvede} da z ustreznim faznim dogovorom to vedno doseči. Ali pač ne?! Berryjeva ukrivljenost meri korekcijo k fazi v okolici nekoga $\vec{\ell}$, ki je ne moremo odpraviti.

ko tvorimo valovni paket, so potrebne korekcije.

Ekvivalentno popravilu v operatorju lege:

$$\hat{x} = i\nabla_k + \vec{A}_n(\vec{k})$$

$$H = E_n(\vec{k}) + U(\vec{R}) \rightarrow H' = E_n(\vec{k}) + U(i\nabla_k + \vec{A}_n(\vec{k}))$$

$$[x_i, x_j] = i\epsilon_{ijk} \Omega_{n,k}(\vec{k})$$

Enačbe gibanja:

$$1) \quad k \frac{d\vec{k}}{dt} = -i[\vec{k}, H] = -\nabla_k U(\vec{R}) \quad \text{isto.}$$

$$2) \quad k \vec{v} = -i[\vec{x}, H] = \nabla_k E_n(\vec{k}) + \nabla_k U \times \vec{\Omega}_n(\vec{k}) \quad (\text{brez dokaza})$$

Luttingerjeva anomalna hitrost

$\vec{\Omega}_n(\vec{k})$ je od nič različem predpisem v materialih z časovno simetrijo na ohrat časa in/ali inverzijo.

$$\left. \begin{array}{l} \text{TRI: } \vec{\Omega}_n(\vec{k}) = -\vec{\Omega}_n(\vec{k}) \\ \text{inverzija: } \vec{\Omega}_n(-\vec{k}) = \vec{\Omega}_n(\vec{k}) \end{array} \right\} \text{ oboje: } \vec{\Omega}_n = 0$$

$\vec{\Omega} \neq 0$ lahko tudi v zelo simetričnih kristalih, če je sklopitev spin-orbitarni.

Pomembno za razlago Hallovega pojava, anomalnega Hallovega pojava, topoloških izolatorjev + za moderno teorijo električne polarizacije in orbitalni magnetizem.

Fe, v E polju $\Rightarrow$ tok $\perp$ na $\vec{E}$ (anomalni Hallov pojav), zaradi $-e\vec{E} \times \vec{\Omega}_n$.

Spinski Hallov pojav $\Rightarrow$ prečen spinski tok, zaradi $\vec{\Omega}_{n\uparrow}(\vec{k}) = -\vec{\Omega}_{n\downarrow}(\vec{k})$.

Uporabno za spinski pomnilnik, SOT-RAM = spin-orbit torque.

Chernovo število (2D): $C_n = \frac{1}{2\pi} \int \mathcal{R}_{n,xy} d^2k \in \mathbb{Z}$

Integral Berryjeve ukrivljenosti po prvi BZ.

Globalna lastnost (unič).

Ne moremo konsistentno definirati faze v celi BZ, zato
ne moremo konstruirati globalno definiranih lokaliziranih
Wannierjevih funkcij za tak pas. Temu rečemo "obstrukcija".
Prezamo z obstojem neloaliziranih valnih stanj.

To so 2D topološki izolatorji.

DG Lu, 19.3.2024