



Πανεπιστήμιο Κύπρου  
Τμήμα Φυσικής

Κβαντικό Φαινόμενο Hall  
και η απαρχή μιας νέας εποχής  
Τοπολογικών Φάσεων  
στη Στερεά Κατάσταση

Διπλωματική εργασία από: **Λούκα Χριστούδια**

Επιβλέπων καθηγητής: **Κωσταντίνος Μουλόπουλος**

ΔΕΚΕΜΒΡΙΟΣ 2020

## Ευχαριστίες:

Θα ήθελα να ευχαριστήσω τον Δρ. Κωνσταντίνο Μουλόπουλο για την ακούραστη καθοδήγηση, την αξιοσημείωτη βοήθεια και υποστήριξή του καθ' όλη τη διάρκεια αυτής της πτυχιακής εργασίας. Ο χρόνος που αφιέρωσε για την τελειοποίησή της, καθώς και οι ανεκτίμητες συμβουλές του έπαιξαν καθοριστικό ρόλο για την τελική της μορφή.

Θα ήθελα επίσης να ευχαριστήσω την οικογένειά μου για την υποστήριξη και την συνεχή ενθάρρυνσή τους αυτά τα τέσσερα χρόνια.

## Περιεχόμενα

Ευχαριστίες:.....	2
Κεφάλαιο 1: Η Επιστήμη του σήμερα, τεχνολογία του αύριο .....	5
Μοντέλο ελευθέρων ηλεκτρονίων .....	7
Μοντέλο σχεδόν-ελευθέρων ηλεκτρονίων .....	10
Μέταλλα .....	15
Μονωτές .....	16
Ημιαγωγοί.....	17
Τοπολογικοί μονωτές .....	18
Οι εφαρμογές των τοπολογικών υλικών στην τεχνολογία.....	24
Κεφάλαιο 2- Κβαντικό φαινόμενο Hall .....	25
Κλασσικό φαινόμενο Hall .....	25
Πως ανακαλύφθηκε.....	25
Θεωρία.....	26
Κβαντικό Φαινόμενο Hall .....	29
Πρόβλημα Landau.....	29
Ιδιοσυναρτήσεις του προβλήματος Landau .....	33
Ο εκφυλισμός των καταστάσεων- Πεπερασμένη επιφάνεια S.....	35
Παράγοντας κατάληψης-Filling Factor $\nu$ .....	37
Πυκνότητα καταστάσεων (ανα μονάδα επιφάνειας) .....	38
Πόση επιφάνεια καταλαμβάνει κάθε μικροκατάσταση; .....	38
Το επιχείρημα του Laughlin .....	38
Καταστάσεις των άκρων.....	43
Κεφάλαιο 3 .....	48
Κινηματική ορμή.....	48
Οι φαινομενικά αθώοι μετασχηματισμοί βαθμίδας.....	50
Μετασχηματισμοί βαθμίδας: .....	51
Κεφάλαιο 4: Berryology.....	54
Θεωρία.....	54
Μαγνητικό Μονόπολο Dirac: .....	63
Ακέραιο Κβαντικό Φαινόμενο Hall από τοπολογική σκοπιά .....	69
Βιβλιογραφία .....	72



## Κεφαλαίο 1: Η Επιστήμη του σήμερα, τεχνολογία του αύριο

Ο άνθρωπος αποτελεί το μοναδικό είδος πάνω στη γη που μπόρεσε να βελτιώσει τη ζωή του, να αναπτύξει το βιοτικό του επίπεδο και να δει πιο 'βαθιά' τον κόσμο. Ο άνθρωπος των σπηλαίων που σκάλιζε τις πέτρες πριν περίπου 6 χιλιαίτες σήμερα σκαλίζει περίτεχνα το πυρίτιο και το γερμάνιο για να φτιάξει νέες τεχνολογίες που αποσκοπούν στην διευκόλυνση της καθημερινότητάς του και να ξεκλειδώσει τα μυστικά της φύσης.

Προσπαθούμε να συμβαδίσουμε στο ρυθμό της σύγχρονης ζωής εφόσον οι ανακαλύψεις και οι εφευρέσεις που γίνονται καθημερινά αλλάζουν συνεχώς την καθημερινότητά μας. Η τεχνολογία και η επιστήμη δεν έχει σταματήσει ούτε στιγμή να εξελίσσεται ραγδαία, και αυτό το επιβεβαιώνει η ανακάλυψη νέων υλικών και ιδιοτήτων της φύσης που γίνονται μέχρι και τη στιγμή που διαβάζεται αυτό εδώ το κείμενο. Η εποχή όπου η πέτρα, ο μπρούντζος και το σίδηρο ήταν τα κυρίαρχα υλικά στην καθημερινότητα του ανθρώπου έχουν παρέλθει και πλέον οι ημιαγωγοί άγουν την ανθρωπότητα.

Πως φτάσαμε να μιλάμε για αγωγούς, μονωτές και ημιαγωγούς; Οι όροι αναφέρονται σε σώματα που δια μέσου αυτών ρέει ο ηλεκτρισμός (δηλ. ηλεκτρικά φορτία), άλλοτε δεν ρέει, και άλλοτε μπορεί, ανάλογα με τις συνθήκες, να συμβαίνει οποιοδήποτε από τα δύο. Αυτή η ιδιότητα των σωμάτων, να μπορούν να διαρρέονται από ηλεκτρικά φορτία, ήταν γνωστή από τα τέλη του 18ου αιώνα, ωστόσο μια θεωρητική απάντηση (και ένα κριτήριο) στο γιατί (και πότε) συμβαίνει αυτό έδωσε για πρώτη φορά ο Alan Wilson με την χρήση των ενεργειακών ζωνών (που είχαν προηγουμένως προκύψει θεωρητικά από τον Felix Bloch (βραβείο Nobel 1952) και το διάσημο θεώρημά του). Από τον 19ο αιώνα και μέχρι να φτάσει σε αυτό το κριτήριο ο Wilson η επιστήμη

άλλαξε ριζικά με την ανακάλυψη της κβαντικής φύσης της ύλης. Θα δούμε λοιπόν σιγά σιγά πως αρχίσαμε να μιλάμε για τον διαχωρισμό των υλικών σε κατηγορίες, ανάλογα πάντα με την ικανότητά τους να άγουν ηλεκτρικό ρεύμα.

Όλο το παρόν δοκίμιο είναι στην ουσία μια μελέτη των ιδιοτήτων συστημάτων που εμπίπτουν στην γνωστική περιοχή της στερεάς κατάστασης και μάλιστα επικεντρωμένη σε καθαρά κβαντικές τους ιδιότητες. Πρέπει λοιπόν να παρουσιαστούν στην αρχή κάποια πολύ σημαντικά θεωρήματα της κβαντικής στερεάς κατάστασης. Στερεά καταρχάς είναι τα υλικά όπου στη μεγάλη τους πλειοψηφία τα άτομα βρίσκονται κατανεμημένα πάνω σε κρυσταλλική δομή (δηλ. μια δομή που παρουσιάζει περιοδικότητα στο χώρο<sup>\*</sup>). Τα ηλεκτρόνια κινούνται μέσα στην κρυσταλλική δομή αλληλεπιδρώντας με τα άτομα. Το μοντέλο με το οποίο θα αρχίσουμε είναι ένα πολύ θεωρητικό μοντέλο (που δουλεύει όμως συχνά με μεγάλη ακρίβεια στην εξήγηση των πειραμάτων) όπου τα ηλεκτρόνια δεν αλληλεπιδρούν με τα άλλα ηλεκτρόνια - και δεν αλληλεπιδρούν ούτε με τα άτομα του κρυστάλλου. Πρόκειται για μια κομψή περιγραφή των (λεγομένων ελευθέρων) ηλεκτρονίων, που θα μας εισαγάγει στον κόσμο της κβαντικής μηχανικής.

\* Άλλες κατηγορίες στερεών είναι τα άμορφα (disordered) με εντελώς τυχαία διευσθέτηση των ατόμων και οι quasicrystals (όπου υπάρχει δομή στο χώρο, αλλά δεν είναι περιοδική).

## Μοντέλο ελευθέρων ηλεκτρονίων

Ας αρχίσουμε με τη συμπεριφορά των ηλεκτρονίων όταν είναι ελεύθερα μέσα σε ένα στερεό, δηλαδή χωρίς να επιδρά κανένα πεδίο δυνάμεων (αλλά ούτε και δυναμικό) πάνω τους (και όταν αγνοήσουμε και τις μεταξύ τους αλληλεπιδράσεις). Στην κλασσική μηχανική τα ηλεκτρόνια συμπεριφέρονται σαν μικροσκοπικές μπαλίτσες, οι οποίες μπορούν να έχουν οποιαδήποτε τιμή ενέργειας (μόνο κινητικής) ανάλογα με την ταχύτητα που κινούνται – ωστόσο τα ηλεκτρόνια στην κβαντομηχανική παίρνουν συγκεκριμένες (ενίοτε διακριτές ή κατά τμήματα συνεχείς) τιμές ενέργειας που εξαρτώνται από τη λύση της εξίσωσης Schrödinger στο χωρίο όπου ορίζεται το κβαντικό αυτό σύστημα ηλεκτρονίων (αν το χωρίο είναι όλος ο άπειρος χώρος, τότε οι επιτρεπόμενες ενέργειες βγαίνουν να είναι συνεχείς).

Τι είναι αυτή η εξίσωση Schrödinger; Η εξίσωση Schrödinger είναι μια διαφορική εξίσωση (με μερικές παραγώγους ως προς χωρικές μεταβλητές και ως προς χρόνο) που προτάθηκε από τον Αυστριακό φυσικό Erwin Schrödinger για να περιγράψει την χρονική και χωρική εξάρτηση των κυματοσυναρτήσεων των κβαντομηχανικών συστημάτων. Μια πολύ σημαντική έννοια, η κυματοσυνάρτηση  $\Psi(\mathbf{r},t)$ , είναι μιά μιγαδική συνάρτηση χώρου και χρόνου που στην φυσική περιγράφει μαθηματικοποιημένα ένα κβαντικό κύμα (και που έχει κρυμμένη φυσική σημασία, με την έννοια ότι το μέτρο της υψωμένο στο τετράγωνο (το  $|\Psi(\mathbf{r},t)|^2$ ) περιγράφει την πυκνότητα πιθανότητας να μετρηθεί το κβαντικό σωματίδιο σε κάποιο σημείο του χώρου  $\mathbf{r}$  τη χρονική στιγμή  $t$ ).

Τι σχέση έχουν όμως τα ηλεκτρόνια με τα κύματα; Τα ηλεκτρόνια έχουν δυαδική μορφή, έχουν σωματιδιακή και κυματική φύση ταυτόχρονα (όπως άλλωστε έχει και κάθε άλλο κβαντικό σωματίδιο).

Για θέματα αυτού του δυισμού της ύλης, ο αναγνώστης καλείται να ανοίξει ένα καλό βιβλίο κβαντομηχανικής, ή ακόμη και να το ψάξει στο διαδίκτυο, μια και το παρόν δοκίμιο δεν έχει σκοπό να ασχοληθεί με τέτοια πολύ βασικά ερωτήματα της κβαντομηχανικής στην γενικότητά τους. Πίσω στα δικά μας λοιπόν (με στόχο δηλαδή να δοθεί έμφαση στην κβαντική συμπεριφορά των στερεών).

Η (λεγόμενη χρονικά-ανεξάρτητη) εξίσωση Schrödinger για το χωρικό μόνο μέρος  $\Psi(x)$  μιάς κυματοσυνάρτησης καλά-ορισμένης ενέργειας ενός ελεύθερου ηλεκτρονίου πάνω στο οποίο δεν επιδρά κανένα δυναμικό (και έχουμε πάρει αρχικά για απλότητα μονοδιάστατο σύστημα) είναι η ακόλουθη

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = E\Psi$$

Η εξίσωση είναι της μορφής,  $\Psi'' + k^2\Psi = 0$ , με  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ .

Επομένως η λύση (σε άπειρη ευθεία και με συνοριακές συνθήκες απλά να μην απειρίζονται αυτές οι λύσεις στο  $\pm\infty$ ) θα είναι της μορφής επίπεδου κύματος  $\Psi \sim e^{ikx}$  με ενέργεια

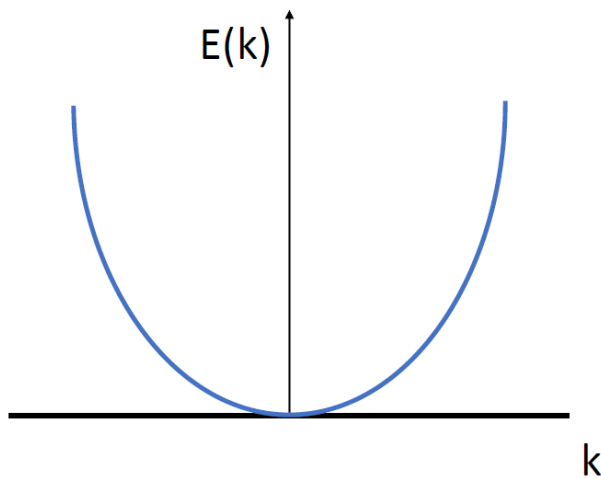
$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (\text{όπου το } k \text{ έχει επεκταθεί να μπορεί να παίρνει και αρνητικές τιμές}).$$

Το  $k$  είναι ο πασίγνωστος κυματαριθμός. Έπειτα κάτι πολύ σημαντικό - και θα το δείτε αρκετές φορές αν ασχολείστε ή θα ασχοληθείτε με την φυσική - είναι ο 'χώρος  $k$ ', ο λεγόμενος χώρος των ορμών. Χρησιμοποιήσαμε την ορολογία αυτή εφόσον οι ποσότητες  $\hbar k$  (η σχέση  $p = \hbar k$  είναι ουσιαστικά η σχέση de Broglie) είναι οι ιδιοτιμές



του τελεστή της κανονικής ορμής  $p$  (ο οποίος ως γνωστόν σε αναπαράσταση θέσης δρά ως ο διαφορικός τελεστής  $p = -i \hbar d/dx$ ) – αυτό φαίνεται με απλή δράση του  $-i \hbar d/dx$  πάνω στο  $e^{ikx}$ .

Στο ελεύθερο ηλεκτρόνιο, λόγω της σχέσης  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  [6] το διάγραμμα ενέργειας-ορμής που προκύπτει είναι το ακόλουθο (μια απλή παραβολή σε μία διάσταση).



Κάποιες σημαντικές παρατηρήσεις σχετικά με το πάνω (συνεχές) ενεργειακό φάσμα (για σύγκριση με αποτελέσματα που θα ακολουθήσουν στη συνέχεια) είναι: πρώτον, η κυματοσυνάρτηση έχει απλά τη μορφή επίπεδων κυμάτων – δεύτερον, υπάρχει μόνο μια “ενεργειακή ζώνη” (με τιμές της ενέργειας από το μηδέν έως το άπειρο) – και τελευταίο, η ενεργειακή εξάρτηση από την ορμή δεν έχει καμιά περιοδικότητα.

Να πούμε τέλος ότι, δεδομένης της υπόθεσης μη-αλληλεπιδρώντων μεταξύ τους ηλεκτρονίων, το πλήρες σύστημα πολλών (αστρονομικά μεγάλου αριθμού) ηλεκτρονίων που υπάρχουν μέσα σε ένα μακροσκοπικό στερεό – και ιδιαίτερα η

χαμηλότερη κβαντική τους κατάσταση – μπορεί να μελετηθεί άμεσα με χρήση των πάνω αποτελεσμάτων που αφορούν ένα μόνο ηλεκτρόνιο. Πώς; Μα βέβαια με “κατάληψη” των πάνω καταστάσεων ενός ηλεκτρονίου (επιπέδων κυμάτων) και μάλιστα με τρόπο που να είναι συμβατός με την απαγορευτική αρχή του Pauli (που λέει ότι δύο ηλεκτρόνια δεν μπορούν να καταλαμβάνουν την ίδια κβαντική κατάσταση – αν λοιπόν ληφθεί υπόψιν και το σπιν-1/2 των ηλεκτρονίων, τότε κάθε τροχιακή κατάσταση (δηλ. επίπεδο κύμα που αντιστοιχεί σε κάποιο  $k$ ) μπορούν να την έχουν το πολύ 2 ηλεκτρόνια με αντίθετα σπιν).

Το μοντέλο ελεύθερων ηλεκτρονίων δίδει μια καλή ερμηνεία χαρακτηριστικών μετάλλων, εξηγώντας την θερμοχωρητικότητα, την ηλεκτρική και την θερμική αγωγιμότητα και τη μαγνητική τους επιδεκτικότητα.

Ωστόσο περιέχει αδυναμίες καθώς δεν μπορεί να εξηγήσει την διάκριση μεταξύ μετάλλων, μονωτών και ημιαγωγών, την ύπαρξη θετικών τιμών συντελεστή Hall (οπές) καθώς και άλλα φαινόμενα/ιδιότητες (για τις οποίες παίζει ρόλο η παρουσία των ιόντων του κρυστά

λλου).

### Μοντέλο σχεδόν-ελευθέρων ηλεκτρονίων

Το μοντέλο στηρίζεται στην θεώρηση ασθενούς κρυσταλλικού δυναμικού που εμφανίζει την περιοδικότητα του πλέγματος και αλληλεπιδρά με τα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας.

Στην εικόνα αυτή των σχεδόν-ελευθέρων ηλεκτρονίων ξεκινούμε πρώτα με τα ελεύθερα ηλεκτρόνια που είδαμε πάνω (και με το πάνω παραβολικό ενεργειακό φάσμα

για μονοδιάστατο σύστημα) και ανάβουμε λίγο (σαν μια μικρή διαταραχή) το εξωτερικό περιοδικό δυναμικό του κρυστάλλου (το οποίο για απλότητα ας το υποθέσουμε να περιγράφει ένα πλέγμα Bravais, με κρυσταλλική σταθερά (δηλ. περίοδο)  $a$ ). Με χρήση χρονικά-ανεξάρτητης θεωρίας διαταραχών μπορεί κανείς να βρει [17] ότι τα περισσότερα τμήματα της πάνω παραβολής δεν υφίστανται καμμία αλλαγή σε 1η τάξη (ως προς τη διαταραχή), αλλά υπάρχει δραματική αλλαγή τους όταν είμαστε στη γειτονιά κάποιων ειδικών σημείων των ατόμων του κρυστάλλου (στο χώρο  $k$ ),  $k=n\pi/a$  με  $n$ : ακέραιο (τα λεγόμενα άκρα των ζωνών Brillouin).

Η συμπεριφορά των κυματοσυναρτήσεων καθορίζεται από την εξίσωση Schrödinger:

$$-\frac{\hbar}{2m}\nabla^2\psi(r) + V(r)\psi(r) = E\psi(r)$$

Η συμπεριφορά του ηλεκτρονίου προσδιορίζεται από την εξίσωση Schrödinger:

$$-\frac{\hbar}{2m}\nabla^2\psi(r) + V(r)\psi(r) = E\psi(r)$$

Προκύπτει γενικότερα από την περιοδικότητα του δυναμικού, ότι οι λύσεις της εξίσωσης Schrödinger πρέπει να ικανοποιούν το θεώρημα Bloch, που σε μία διάσταση γράφεται όπως πιο κάτω

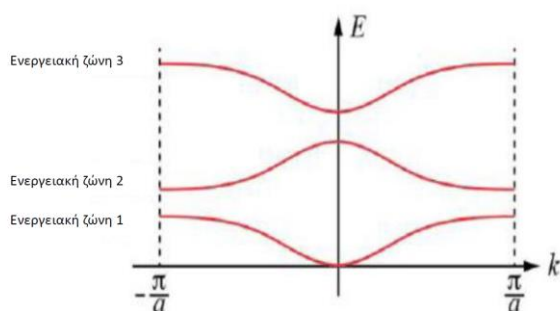
$$\Psi_k(x) = u_k(x)e^{ikx}$$

όπου η συνάρτηση  $u_k(x)$  είναι περιοδική με την περίοδο του κρυστάλλου  $a$ . Δεν διαδίδονται όμως όλα αυτά τα ηλεκτρονικά κύματα (όπως είναι ο όρος που χρησιμοποιείται για τις πάνω συναρτήσεις Bloch) στο πλέγμα του κρυστάλλου. Τα

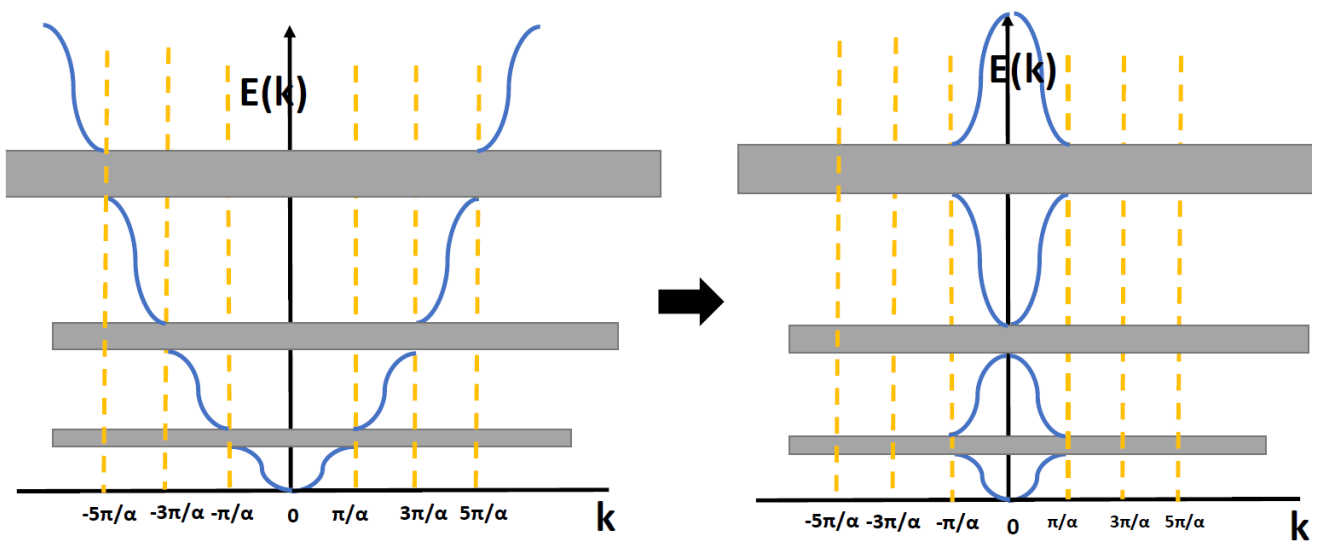
κύματα μπορούν να ανακλαστούν και να περιθλαστούν (όταν συμβάλλουν τα ανακλώμενα κύματα προσθετικά).

Το θεώρημα Bloch εκφράζει ότι η κυματοσυνάρτηση καλά-ορισμένου  $k$  και καλά-ορισμένης ενέργειας (κοινή ιδιοσυνάρτηση της χαμιλτονιανής και όλων των διακριτών τελεστών μετατόπισης που την αφήνουν αναλλοίωτη) είναι επίπεδο κύμα διαμορφωμένο από μια συνάρτηση που έχει την περιοδικότητα του πλέγματος.

Για κάθε τιμή του  $k$ , αν σχεδιάσουμε τις λύσεις-ιδιοτιμές  $E_k$ , για  $n=1,2,3,\dots$ , προκύπτει ένα φάσμα ενεργειών που ονομάζονται ενεργειακές ζώνες.



Δημιουργείται έτσι στα όρια της ζώνης Brillouin ένα εύρος ενεργειών στην οποία δεν επιτρέπεται η διάδοση (τρεχόντων) κυμάτων στον (άπειρο) κρύσταλλο. Αυτό το εύρος ορίζει ένα ενεργειακό χάσμα.



Με αυτή την εικόνα μπορούμε εύκολα να διαφοροποιήσουμε τα υλικά σε μέταλλα, μονωτές και ημιαγωγούς (όπως θα δούμε στη συνέχεια).

Οι καταλήψεις των ηλεκτρονίων (σύμφωνα με την αρχή του Pauli) είναι καταλήψεις των τροχιακών καταστάσεων ενός ηλεκτρονίου (άρα των κβαντωμένων τιμών του  $k$  (που προκύπτουν από τις περιοδικές συνοριακές συνθήκες (Born Von Karman [17]) όπου  $k = \frac{s\pi}{L}$  όπου  $s$  ένας άλλος ακέραιος (ο οποίος μέσα σε μια ζώνη παίρνει  $N$  διαφορετικές τιμές).

Και αν τα ηλεκτρόνια θεωρηθούν ότι είναι χωρίς σπιν, τότε κάθε τέτοια τιμή του  $k$  την παίρνει μόνο ένα ηλεκτρόνιο (αλλιώς, στην αληθινή ζωή, την παίρνουν 2 ηλεκτρόνια με αντίθετα σπιν).

Για να ισχύουν τα κάτω (και η ταξινόμηση Wilson) η πάνω κβάντωση των  $k$  είναι σημαντική! (ώστε να έχει νόημα το μέτρημα των επιτρεπόμενων καταστάσεων – και μετρά ο αριθμός τους να συγκρίνεται με τον αριθμό των ηλεκτρονίων).

Για το απλό μας παράδειγμα (για την κβάντωση των  $k$ ) ο αριθμός των ατόμων ισούται με  $N_{cells} = \frac{L}{a}$  όπου  $L$  είναι το μήκος του κρυστάλλου (θεωρούμενο πολύ μεγάλο, στο λεγόμενο θερμοδυναμικό όριο) και  $a$  η απόσταση μεταξύ 2 γειτονικών ατόμων (ή γενικότερα κρυσταλλικών σημείων).

Είναι τότε εύκολο να δει κάποιος ότι, αν ο αριθμός των ηλεκτρονίων (χωρίς σπιν)  $N$ , ισούται με τον αριθμό των ατόμων  $N_{cells}$  ή αν είναι ακέραιο πολλαπλάσιο  $N = lN_{cells}$ , τότε η πρώτη ενεργειακή ζώνη (ή  $l$  ζώνες) στον χώρο Brillouin γεμίζουν πλήρως.

Στη γειτονιά των ειδικών σημείων ( $k = n\frac{\pi}{a}$ ) (που ονομάζονται άκρα των ζωνών Brillouin), στο ενεργειακό φάσμα θα πρέπει να οριζοντιώνεται και από τις 2 μεριές του (έτσι ώστε να μηδενίζεται η παράγωγος  $dE/dk$  (που είναι ουσιαστικά η ομαδική ταχύτητα κυματοπακέτων που φτιάχνονται με υπέρθεση κυματοσυναρτήσεων με τιμές του  $k$  σε αυτή την περιοχή) λόγω της λεγόμενης περίθλασης Bragg των ηλεκτρονικών κυμάτων μέσα στον κρύσταλλο των ιόντων). Ως αποτέλεσμα, στα ειδικά αυτά σημεία του χώρου  $k$  (στα άκρα των ζωνών Brillouin) ανοίγονται “ενεργειακά χάσματα” (περιοχές ενεργειών που είναι απαγορευμένες για τα ηλεκτρόνια), και ένα παράδειγμα φαίνεται στα προηγούμενα αλλά και στο επόμενο σχήμα.

Τι γίνεται όμως όταν τα ηλεκτρόνια δεν γεμίζουν πλήρως μια ενεργειακή ζώνη (δηλαδή όταν  $N \neq lN_{cells}$ ); Τότε τα ηλεκτρόνια έχουν διαθέσιμες γειτονικές ενεργειακές καταστάσεις και πολύ εύκολα (δηλ. χωρίς καθόλου ενεργειακό κόστος) μπορούν να κινηθούν σε αυτές, παραβιάζοντας ενδεχόμενα την κατοπτρική συμμετρία στον χώρο των ορμών, γεγονός (ασυμμετρία) που δίνει κίνηση των ηλεκτρονίων (άρα δημιουργία

ηλεκτρικού ρεύματος) προς μια κατεύθυνση στον αληθινό χώρο. Αυτά τα υλικά χαρακτηρίζονται ως αγωγοί. Έχουμε λοιπόν ένα πολύ απλό κριτήριο (a counting argument), τουλάχιστον σε μηδενική θερμοκρασία ( $T=0$ ) που μπορεί να αποφασίσει πότε ένα υλικό είναι αγώγιμο και πότε είναι μονωτικό (όταν δημιουργήσουμε αυτή την ασυμμετρία εφαρμόζοντας μια μικρή διαφορά δυναμικού στα άκρα του υλικού).

## Μέταλλα

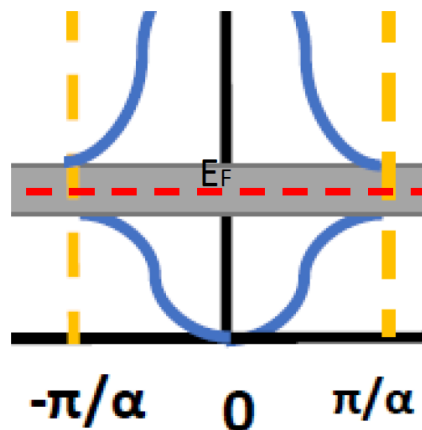
Τα μέταλλα δεν έχουν πλήρως κατειλημμένες όλες τις ενεργειακές τους ζώνες. Η ανώτερη ζώνη είναι μερικώς κατειλημμένη – η λεγόμενη ζώνη αγωγιμότητας (και όλες βέβαια οι από πάνω της είναι πλήρως άδειες), οπότε και η ενέργεια Fermi (που είναι η μέγιστη κατειλημμένη ενέργεια ενός φερμιονικού σωματιδίου (ηλεκτρονίου)) είναι μέσα στη ζώνη. Επομένως υπάρχουν γειτονικές (σε ενέργεια) διαθέσιμες άδειες καταστάσεις όπου μπορεί να μεταπηδήσει το ηλεκτρόνιο (αλλά πάντα στο χώρο  $k$ ) και έτσι είναι δυνατόν τα ηλεκτρόνια να υποστούν μετάπτωση (transition) σε διαφορετικές καταστάσεις ορμής και άρα να δημιουργηθεί στον πραγματικό χώρο ηλεκτρικό ρεύμα (και αυτό συμβαίνει όποτε έχουμε την πάνω ασυμμετρία κατάληψης μεταξύ κάποιου  $k$  και του αντίθετου  $-k$ ). Αυτή λοιπόν η μετάπτωση στο χώρο  $k$  μεταφράζεται στον αληθινό χώρο σαν ροή ρεύματος. Και όπως μας είναι όντως γνωστό από τα στοιχειώδη στο σχολείο αλλά και την καθημερινότητά μας, μέταλλα είναι τα υλικά που επιτρέπουν τη ροή ρεύματος από μέσα τους.

Σε μεγαλύτερες διαστατικότητες από το πάνω μας παράδειγμα (δισδιάστατους και τρισδιάστατους κρυστάλλους) μπορεί να έχουμε δύο ειδών μέταλλα: μέταλλα όπου απλά είναι μερικώς κατειλημμένες η ζώνες (όπως τα πάνω παραδείγματα) και μέταλλα

όπου γίνεται επικάλυψη ζωνών (band overlap). Στη δεύτερη περίπτωση, παρόλο που από το κριτήριο Wilson οι πλήρως γεμάτες (ή άδειες) ζώνες θα έπρεπε να σημαίνουν μονωτή (βλέπετε στη συνέχεια), μπορεί να έχουμε και πάλι μέταλλο, μια και η band overlap δημιουργεί καινούργιες ενεργειακά διαθέσιμες άδειες καταστάσεις (για τα ηλεκτρόνια να σκεδαστούν σε αυτές). Αλλά, για τους σκοπούς αυτής της εργασίας, δεν θα χρειαστεί να ασχοληθούμε με τέτοιες περιπτώσεις.

### Μονωτές

Στους μονωτές συμβαίνει ακριβώς το αντίθετο. Ο αριθμός των ηλεκτρονίων (χωρίς σπιν)  $N$ , ισούται με τον αριθμό των ατόμων  $N = N_{cells}$  ή, γενικότερα, με ακέραιο πολλαπλάσιο  $N = l N_{cells}$ , οπότε έχουμε  $l$  γεμάτες (αλλά και από πάνω τους άπειρες άδειες) ζώνες.



Σε αυτή την περίπτωση δεν μπορούν τα ηλεκτρόνια (σε  $T=0$ ) να μεταπηδήσουν σε άλλες ενεργειακές καταστάσεις στον χώρο  $k$  άρα, ακόμα και αν εφαρμοσθεί μια (μικρή) διαφορά δυναμικού στα άκρα αυτού του υλικού, το υλικό δεν άγει (δεν έχουμε ροή ρεύματος).

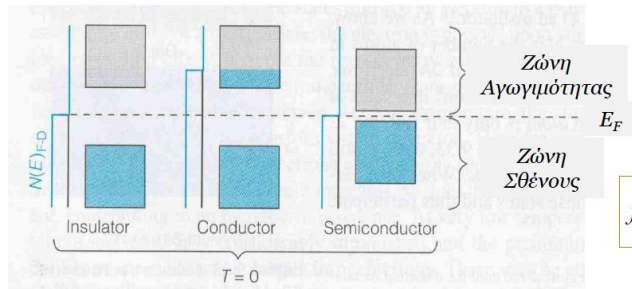


## Ημιαγωγοί

Στα πειράματα όμως έχουμε μη-μηδενικές θερμοκρασίες. Άρα τα πάνω απλά μπορεί να παραβιαστούν λίγο, λόγω των θερμικών διακυμάνσεων (ή, αλλιώς, έχουμε τον παράγοντα του Boltzmann που τώρα δεν είναι μια καθαρή θήτα συνάρτηση (η γνωστή ασυνεχής step function), αλλά έχει μικρές ουρές με έστω και μικρή πιθανότητα κατάληψης και των πάνω (άδειων σε  $T=0$ ) ζωνών). Έτσι, στην πράξη, εκτός από αγωγούς και μονωτές υπάρχουν και οι ημιαγωγοί – υλικά (που θα ήταν μονωτικά σε  $T=0$ ) με μικρό ενεργειακό φάσμα (μικρότερο από  $4 eV$ ), με αποτέλεσμα όταν είναι π.χ. πλήρης μιά ενεργειακή ζώνη, τα ηλεκτρόνια να μπορούν να μεταβούν στην επόμενη ζώνη (που θα ήταν άδεια σε  $T=0$ ) εύκολα (λόγω μη μηδενικού παράγοντα Boltzmann) και επομένως μπορεί να έχουμε ροή ηλεκτρισμού (η οποία μάλιστα μπορεί να ελεγχθεί με λεπτομερειακό τρόπο).

Οι ημιαγωγοί ως καθαρά υλικά δεν είναι στην πιο αξιοποιήσιμη μορφή τους, εφόσον δεν είναι ούτε καλοί αγωγοί ούτε καλοί μονωτές. Για να γίνουν πλήρως εκμεταλλεύσιμοι πρέπει να περάσουν μια διαδικασία που ονομάζεται doping όπου αυξάνεται (με εμπλουτισμό) και ελέγχεται κατά βούληση ο αριθμός των ηλεκτρονίων ή των οπών στον κρύσταλλο.

Οι ημιαγωγοί έφεραν την τεχνολογική επανάσταση τον 20 αιώνα κυρίως με τα τρανζίστορ τα οποία είναι εμπλουτισμένοι ημιαγωγοί μέσα από τους οποίους μπορούμε να ελέγξουμε την ροή ηλεκτρισμού ανάλογα με την τάση που εφαρμόζουμε στα άκρα τους. Κάθε συσκευή σήμερα έχει από χιλιάδες μέχρι δισεκατομμύρια τρανζίστορ (όπως η επεξεργαστές Intel Core τρίτης γενιάς που έχουν 1,48 δις τρανζίστορ σε επιφάνεια ίση περίπου όσο ένα ανθρώπινο νύχι, πιο πολλούς και από τον πληθυσμό της Κίνας).



Πριν προχωρήσουμε ας πούμε και δύο λόγια για την χρησιμότητα των ημιαγωγών στη ζωή μας. Σκεφτείτε μια ζωή χωρίς καθόλου ηλεκτρονικές συσκευές, χωρίς ραδιόφωνο, χωρίς τηλεόραση, υπολογιστή, ηλεκτρονικά παιχνίδια, και χωρίς εξελιγμένο ιατρικό εξοπλισμό. Όλες οι παραπάνω συσκευές που ο άνθρωπος του 21ου αιώνα τις θεωρεί δεδομένες δεν θα υπήρχαν χωρίς την ανακάλυψη των ημιαγωγών.

### Τοπολογικοί μονωτές

Σήμερα η επιστήμη έχει προχωρήσει πέρα από τους συμβατικούς ημιαγωγούς και έχει κάνει τα πρώτα της βήματα σε μια νέα εποχή, την εποχή των τοπολογικών μονωτών (αλλά πιο πρόσφατα και των τοπολογικών μετάλλων). Οι τοπολογικοί μονωτές [1] δεν είναι ακόμα ευρέως γνωστοί (δηλ. και στο μη-επιστημονικό κοινό) – όπως συμβαίνει με κάθε νέα ανακάλυψη και εφεύρεση που είναι άγνωστη μέχρι να γίνει αναγκαία για την καθημερινότητά μας. Οι τοπολογικοί μονωτές είναι μια νέα γενιά υλικών με το καινούργιο χαρακτηριστικό ότι, για να την κατηγοριοποιήσουμε, πρέπει να ψάξουμε εκτός από τοπικές ιδιότητες (όπως οι τοπικές συμμετρίες) και σε μη-τοπικές (global, non-local) ιδιότητες, με τις πιο σημαντικές να είναι τα λεγόμενα τοπολογικά αναλλοίωτα (topological invariants). Αυτά εμφανίζονται για πρώτη φορά στη φυσική

την τελευταία δεκαπενταετία (υιοθετημένα από τη γνωστική περιοχή της Τοπολογίας στα Μαθηματικά – παρόλο που ως φυσικές ιδιότητες εμφανίζονται όπως θα δούμε με δραματικό τρόπο σε διάφορα και διαφορετικά πειράματα, κυρίως στη φυσική στερεάς κατάστασης και φυσική υλικών).

Από τις δεκαετίες του '70-'80, οι θεωρητικοί φυσικοί David Thouless, Duncan Haldane και Michael Kosterlitz [15] έθεσαν τα θεμέλια για την πρόβλεψη (θεωρητικά) αλλά και την εξήγηση “εξωτικών” συμπεριφορών (σε πειράματα) που οι ερευνητές ανακάλυψαν στις επιφάνειες κάποιων υλικών και μέσα σε εξαιρετικά λεπτά στρώματα της ύλης (και τα τελευταία 15 χρόνια μάλιστα, τέτοιες κβαντικές εξωτικές ιδιότητες τις βλέπουμε στα πειράματα ακόμα και σε θερμοκρασία δωματίου!). Για την εξήγηση των φαινομένων αυτών, έκαναν χρήση για πρώτη φορά επιχειρημάτων (και λεπτομερειακών αναλυτικών υπολογισμών) βασισμένων σε τοπολογία – κερδίζοντας μάλιστα την αναγνώριση της διεθνούς κοινότητας με την πρόσφατη βράβευσή τους με το βραβείο Νόμπελ Φυσικής του 2016.

Οι καταστάσεις ενός τοπολογικού μονωτή σε 2D και 3D υλικά προβλέφθηκαν θεωρητικά το 2005 και το 2007, πριν από την πειραματική τους ανακάλυψη. Η θεωρητική ανακάλυψη βασίστηκε πάνω στη θεωρία των ζωνών για την ενέργεια των ηλεκτρονίων στα στερεά (band theory of solids) - το πρότυπο κβαντομηχανικό πλαίσιο για την κατανόηση των ηλεκτρικών ιδιοτήτων των υλικών, που λίγο σκιαγραφήσαμε στην αρχή αυτής της εργασίας – αλλά πήγαινε πολύ πιο μακριά με τη χρήση τοπολογικών επιχειρημάτων: σε αντιδιαστολή με τη συνηθισμένη θεωρία ενεργειακών ζωνών που αξιοποιεί μόνο τις ιδιοτιμές της χαμιλτονιανής (δηλ. τις ενέργειες στο χώρο  $k$ ), τώρα χρειαζόταν και μια πολύ εκλεπτυσμένη ανάλυση ΚΑΙ των ιδιοκαταστάσεων της χαμιλτονιανής (οι οποίες προκύπτει ότι έχουν μη-τετριμμένη τοπολογία στο χώρο  $k$  φτιάχνοντας ΚΟΜΒΟΥΣ (knots) που δε συμβαίνει ποτέ σε συμβατικά (μη-

τοπολογικά) υλικά). Οι πανεπιστημιακοί καθηγητές φυσικής Charles Kane και Eugene Mele [1] και αργότερα ο Joel Moore [2] μαζί με άλλους επιστήμονες έδειξαν ότι, λόγω των πάνω knots, ειδικές ενεργειακές καταστάσεις επιτρέπουν στα ηλεκτρόνια να άγουν (και μάλιστα χωρίς απώλειες ενέργειας!) στις “άκρες” (edges, σε 2D αντικείμενα) και στις επιφάνειες (σε 3D αντικείμενα) υλικών τα οποία στην υπόλοιπη επιφάνεια ή όγκο τους, αντίστοιχα, είναι μονωτές. Επίσης, έδειξαν ότι οι καταστάσεις αυτές εμφανίζονται αναγκαστικά όταν η δομή της ζώνης (band structure) φέρει μια ορισμένη ιδιότητα, με μη-μηδενική τιμή – που αργότερα, μερικά χρόνια μετά την πρωτοποριακή δουλειά των Thouless *et al.*, η επιστημονική κοινότητα συνειδητοποίησε ότι σχετίζεται με την ευρύτερη γνωστική περιοχή της φάσης του Berry (όπως θα δούμε και στη συνέχεια αυτής της εργασίας στην ενότητα Berry-ολογία), αλλά και στην περαιτέρω χρήση της τοπολογίας – με το διάσημο στα μαθηματικά θεώρημα Gauss-Bonnet να χρησιμοποιείται για πρώτη φορά στη φυσική στερεάς κατάστασης, και να δίνει με τεράστια ακρίβεια (της τάξης του  $10^{-10}$ ) τις τιμές φυσικών μεγεθών που μετρώνται στο πείραμα! (και σε μερικές περιπτώσεις μάλιστα και σε συνθήκες που θα έπρεπε να είναι εντελώς κλασσικές (μη-κβαντικές), λόγω της decoherence από το περιβάλλον).

Μία σχετική τοπολογική ιδιότητα γνωστή ως κβαντικό φαινόμενο Hall [3,4] είχε ήδη βρεθεί σε 2D ταινίες (ribbons) στις αρχές της δεκαετίας του 1980, αλλά η ανακάλυψη του πρώτου παραδείγματος μιας 3D τοπολογικής φάσης επανέφερε το ενδιαφέρον της κοινότητας της φυσικής συμπεκνωμένης ύλης. Δεδομένου ότι η συμπεριφορά ενός 3D τοπολογικού μονωτή θα μπορούσε να παρομοιαστεί με αυτή ενός ημιαγωγού στον κύριο όγκο του και ότι τα τοπολογικά χαρακτηριστικά τους μπορούν να επιβιώνουν στις υψηλές θερμοκρασίες, οι πρωτοποριακές τους ιδιότητες θα μπορούσαν να οδηγήσουν σε κάποιες συναρπαστικές εφαρμογές και να βελτιώσουν την

αποτελεσματικότητα της ηλεκτρονικής επεξεργασίας δεδομένων και της μνήμης των υπολογιστών.

Με την πάροδο των χρόνων, οι επιστήμονες ανακάλυψαν ότι χιλιάδες γνωστά υλικά έχουν πιθανώς τοπολογικές ιδιότητες – μέχρι τώρα έχει εκτιμηθεί ότι είναι τοπολογικά έως και το 24% των υλικών συνολικά! Ενδεικτικά, στα τέλη Ιούλη του 2018, αρκετές ομάδες δημοσίευσαν reports όπου περιέγραφαν λεπτομερώς το σκανάρισμα δεκάδων χιλιάδων υλικών και τις προβλεπόμενες τοπολογικές τους ταξινομήσεις, με βάση αλγόριθμους που χρησιμοποιούν στη χημεία και για τη συμμετρία του υλικού για να υπολογίσουν τις πιθανές τοπολογικές τους ιδιότητες. Μια ομάδα ερευνητών στο Εθνικό Εργαστήριο Φυσικής Συμπυκνωμένης Ύλης του Beijing (Beijing National Laboratory for Condensed Matter Physics), συγκεκριμένα, σκάνανε 39.519 υλικά και ανακάλυψε ότι 8.000 είναι πιθανώς να φέρουν τοπολογικές καταστάσεις. Τέτοιες αναζητήσεις υλικών τροφοδοτούνται από προσομοιώσεις μεγάλης κλίμακας που τρέχουν πάνω σε υπερσύγχρονους υπολογιστές. Πρέπει όμως ίσως να επισημανθεί ότι οι αρχικές ανακαλύψεις δεν έγιναν καθόλου με υπολογιστική δουλειά (η οποία έτσι κι αλλιώς διενεργείται κατά κόρον πάνω σε υλικά επί πολλά χρόνια – ακόμα και σε υλικά που σήμερα ξέρουμε ότι είναι τοπολογικά! – χωρίς κανένα σήμα ότι κάτι καινούργιο και ενδιαφέρον συμβαίνει), αλλά όλες οι αρχικές (αλλά και οι μετέπειτα σημαντικές/θεμελιακές) ανακαλύψεις έγιναν μόνο με αναλυτικές μεθόδους.

Οι επιστήμονες όμως βρίσκονται διαρκώς και σε αναζήτηση νέων μεθόδων (τόρα και αριθμητικών/υπολογιστικών) για την ανακάλυψη τοπολογικών μονωτών. Πάνω σε αυτή τη βάση, στο Ελβετικό Ομοσπονδιακό Ινστιτούτο Τεχνολογίας Ζυρίχης (ETH Zurich), ανέπτυξαν το λογισμικό Z2Pack, το οποίο είναι μια βιβλιοθήκη ανοικτού κώδικα για τον υπολογισμό των τοπολογικών μεταβλητών για οποιοδήποτε μοντέλο ή σύστημα.

### **Τι είναι τοπολογία;**

Ας δούμε όμως πρώτα τί σημαίνει ότι κάποιες ιδιότητες είναι τοπολογικά αναλλοίωτα. Στα μαθηματικά σημαίνει ιδιότητες που παραμένουν ίδιες όταν παραμορφώνουμε με συνεχή τρόπο ένα (π.χ. στερεό) σχήμα. Από την πρόοδο/έκρηξη στη Φυσική τα τελευταία χρόνια προκύπτει ότι είναι ιδιότητες που είναι σε μεγάλο βαθμό αναισθητες σε (δεν επηρεάζονται από) προσμίξεις με άλλα άτομα που τυχόν έχει το υλικό, παραμορφώσεις ή και άλλες τοπικές συμμετρίες του υλικού, ενώ μπορεί σε κάποια συστήματα να μην επηρεάζονται ούτε καν από θερμικές διακυμάνσεις (!) που συνήθως καταστρέφουν τον κβαντικό χαρακτήρα (μπορεί αυτό να συμβαίνει ακόμα και σε θερμοκρασία δωματίου!, όπως π.χ. το Κβαντικό Φαινόμενο Hall στη Γραφίνη). Αυτές οι τοπολογικές ιδιότητες είναι λοιπόν αναισθητες σε τοπικές λεπτομέρειες και έχουν χαρακτήρα μη-τοπικό (global) -- μπορεί π.χ. αν αλλάξει λίγο η διάταξη του χώρου να αλλάζουν τα πάντα -- αλλά ο τρόπος που αλλάζουν είναι συνήθως απότομος (διακριτός, κβαντωμένος) και με τιμές που έχουν πολύ μεγάλη ακρίβεια (πράγμα που χρησιμοποιείται στη Μετρολογία, παράδειγμα η πρόσφατη αλλαγή του συστήματος μονάδων SI. Αυτές οι ιδιότητες δημιουργούν μια τάξη υλικών με περίεργες και εξωτικές ιδιότητες σε σύγκριση με τα γνωστά μέχρι τώρα υλικά.

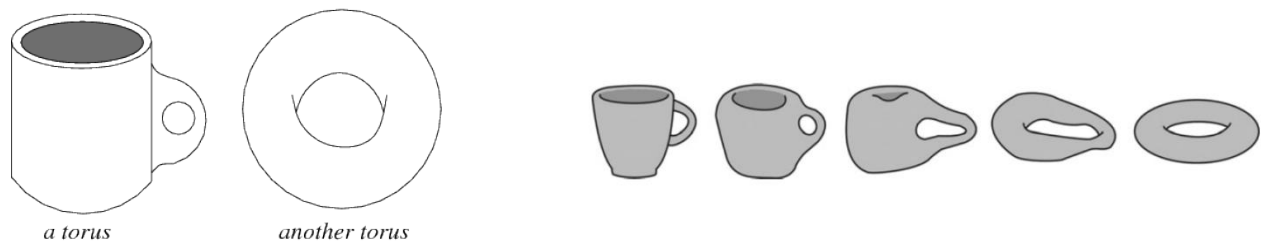
Η έννοια λοιπόν των topological invariants, όπως είπαμε δεν ξεφύτρωσε από το πουθενά αλλά από τον κλάδο της τοπολογίας στα μαθηματικά. Η πιο γνωστή ιδιότητα που δεν αλλάζει κάτω από συνεχείς παραμορφώσεις ενός π.χ. στερεού σχήματος είναι το γένος  $g$ . Ένας ακέραιος αριθμός που είναι ίσος με τον αριθμό των τρυπών στο στερεό.

Το γένος εμφανίζεται στο θεώρημα Gauss -Bonnet

$$\frac{1}{2\pi} \int K dA = n = 2(1 - g)$$

όπου  $K$  είναι η καμπυλότητα του στερεού (που ορίζεται σαν το γινόμενο των αντιστρόφων των 2 χαρακτηριστικών (eigen-) ακτίνων καμπυλότητας ( $K = 1/R_1 \cdot 1/R_2$ ) σε κάθε σημείο της επιφάνειας/σύνορο του στερεού υπό συζήτηση) - και  $n$  ο ακέραιος που καθορίζεται από τον αριθμό των τρυπών  $g$  (με τη σχέση  $n=2(1 - g)$ ).

Παράδειγμα αναλλοιότητας κάτω από συνεχείς παραμορφώσεις (όταν μένει ίδιο το γένος  $g$ ) είναι ένα donut, που (όπως βλέπετε στην εικόνα κάτω) βρίσκεται στην ίδια τοπολογική κλάση (ή, στα μαθηματικά, στην ίδια “ομοτοπική ομάδα”) με ένα φλιτζάνι του καφέ (με μια λαβή):



Το αποτέλεσμα του Gauss-Bonnet θεωρήματος είναι αξιοσημείωτο: όσο και να αλλάζουν οι τοπικές καμπυλότητες του στερεού κατά τη διάρκεια της παραμόρφωσής του, το άθροισμα (ολοκλήρωμα) όλων των καμπυλοτήτων παραμένει σταθερό! – και ουσιαστικά κβαντωμένο με την εμφάνιση του ακεραίου  $n$  – και αυτός ο ακέραιος  $n$  παραμένει σταθερός εφόσον δεν αλλάζει ο αριθμός των τρυπών του στερεού. Αυτό είναι ένα παράδειγμα της περίφημης στις μέρες μας τοπολογικής αναλλοιότητας.

## Οι εφαρμογές των τοπολογικών υλικών στην τεχνολογία

Πολλά υλικά μας είναι χρήσιμα εφόσον αφήνουν το ρεύμα να ρέει μονάχα προς μια κατεύθυνση ή το εμποδίζουν. Επίσης κάποια άλλα υλικά είναι χρήσιμα εφόσον αφήνουν ή σταματούν τη ροή της θερμότητας (π.χ στην cpu), φιλτράρουν το φως (frequency selective glasses ή γυαλιά ηλίου) κλπ. Κάθε κατηγορία υλικών είναι χρήσιμη λοιπόν σε πολλούς τομείς της τεχνολογικής ανάπτυξης.

Άλλα υλικά είναι χρήσιμα στη σημερινή εποχή όπως το πυρίτιο εφόσον λειτουργούν σαν “βαλβίδες” για το ρεύμα (τρανζίστορ), εφόσον μπορούμε να τα ρυθμίσουμε τότε θα άγουν και τότε δεν θα άγουν ρεύμα – τέτοια υλικά υπάρχουν εκατομμύρια μέσα στα κινητά μας.

Εφαρμογές τοπολογικών υλικών:

- 1) Εφαρμογές στο spin filtering. Οι edge states στους τοπολογικούς μονωτές έχουν ηλεκτρόνια με αντίθετα spins που κινούνται σε αντίθετες κατευθύνσεις. Αυτό είναι ιδιαίτερα χρήσιμο στη γνωστική περιοχή των spintronics, μια εξαιρετικά υποσχόμενη τεχνολογία στους υπολογιστές και σε ηλεκτρικές συσκευές, όπου οι ψηφιακές λειτουργίες δεν γίνονται με το φορτίο αλλά με το spin του ηλεκτρονίου.
- 2) Μπορούν να αντικαταστήσουν τους υπεραγωγούς (superconductors) σε εφαρμογές εφόσον είναι gapless (δηλ. έχουν μηδενικό ενεργειακό χάσμα) και εφαρμόζονται σαν κανάλια από τα οποία μπορεί να περάσει πολύ μεγάλο ρεύμα χωρίς να επηρεαστεί το υλικό (λόγω της παρουσίας της edge state).



- 3) Το γεγονός ότι τα τοπολογικά υλικά δεν επηρεάζονται από προσμίξεις τους δίνει μεγάλο πλεονέκτημα έναντι των συμβατικών υλικών (όταν βέβαια χρησιμοποιούνται με τις χαμηλές τους ενεργειακές καταστάσεις).
- 1) Τα πιο πρόσφατα ημιμέταλλα Weyl (Weyl Semimetals) είναι ιδιαίτερα ευαίσθητα στο φως με αποτέλεσμα να μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε night-vision goggles.

## Κεφάλαιο 2- Κβαντικό φαινόμενο Hall

### Κλασσικό φαινόμενο Hall

Πως ανακαλύφθηκε

Μια μοντέρνα θεωρία περί ηλεκτρομαγνητισμού είχε μόλις πρώτο-ειπωθεί από τον James Clerk Maxwell στο άρθρο "On Physical Lines of Force" το οποίο είχε δημοσιευθεί γύρω στο 1861-1862. Ο Maxwell είχε διατυπώσει ολοκληρωμένα το μαθηματικό υπόβαθρο για τον ηλεκτρομαγνητισμό, ωστόσο πολλές λεπτομέρειες για την φυσική προέλευση του ηλεκτρομαγνητισμού ήταν ακόμα υπο διερεύνηση, όπως η αλληλεπίδραση μεταξύ μαγνητικού πεδίου και ηλεκτρικού ρεύματος πάνω σε αγωγούς. Την απάντηση ήρθε να δώσει πολύ νωρίς ο Edwin Hall (8 χρόνια πριν την ανακάλυψη ακόμα του ηλεκτρονίου) δουλεύοντας στην διδακτορική του διατριβή στο Johns Hopkins University στο Baltimore, Maryland. Κατάφερε να πάρει μετρήσεις του φαινομένου στα όργανα που διέθετε και δημοσίευσε το άρθρο "On a New Action of the Magnet on Electric Currents" .

## Θεωρία

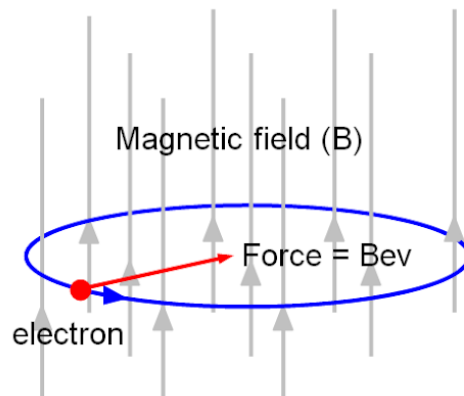
Το φαινόμενο Hall εμφανίζεται όταν εφαρμόσουμε μαγνητικό πεδίο σε έναν αγωγό που ταυτόχρονα διαρρέεται από ρεύμα (ή θα μπορούσε και να μην διαρρέεται, αλλά εφαρμόζουμε και ηλεκτρικό πεδίο που έχει κάθετη συνιστώσα στο μαγνητικό πεδίο).

Το ηλεκτρικό ρεύμα περιλαμβάνει την κίνηση προς μια κατεύθυνση φορτισμένων σωματιδίων όπως ηλεκτρόνια, οπές, ιόντα ή και τα τρία ταυτόχρονα (στα στερεά οι φορείς είναι συνήθως ένα από (ή και) τα δύο πρώτα). Όταν σε αυτούς τους κινούμενους φορείς εφαρμοστεί και κάθετο μαγνητικό πεδίο τότε ασκείται σε αυτά η περίφημη δύναμη Lorentz. Η τροχιά που αρχικά ακολουθεί το φορτισμένο σωματίδιο είναι καμπυλωμένη λόγω αυτής της δύναμης που είναι κάθετη και στο μαγνητικό πεδίο και στο ηλεκτρικό ρεύμα, με αποτέλεσμα (στη διεύθυνση την εγκάρσια στο αρχικό ηλεκτρικό ρεύμα) η μια άκρη του αγωγού να έχει συσσωρευμένο μεγαλύτερο φορτίο από την άλλη (αν βέβαια είναι ανοιχτό το κύκλωμα στην εγκάρσια διεύθυνση – αλλιώς θα είχαμε έξτρα εγκάρσιο ρεύμα!). Έτσι δημιουργείται η τάση Hall (τα άνισα φορτία στις δύο άκρες είναι αντίθετα (αφού το συνολικό υλικό πρέπει να είναι ηλεκτρικά ουδέτερο) – και άρα μπορεί να ειπωθούν ως οι αντίθετα φορτισμένοι οπλισμοί ενός επίπεδου πυκνωτή, που έχουν όντως τη γνωστή διαφορά δυναμικού μεταξύ τους – που συνδέεται με σχέση αναλογίας με την απόσταση των άκρων και με το εσωτερικό ηλεκτρικό πεδίο (“πεδίο Hall”) που δημιουργείται).

Στον ηλεκτρομαγνητισμό η ροή ρεύματος  $I$  ορίζεται από την κίνηση των φορέων  $J = nqv$ . Οπότε όταν οι φορείς είναι ηλεκτρόνια και  $q < 0$  τότε η ροή του ρεύματος έχει αντίθετη κατεύθυνση από την κίνηση των ηλεκτρονίων. Σε μερικά μέταλλα και ημιαγωγούς την κατεύθυνση της  $I$  την καθορίζει η κίνηση των οπών (οπότε το  $I$  έχει φορά την αληθινή φορά της κίνησης των φορέων).

Στην απλή περίπτωση όπου έχουμε μόνο ένα τύπο φορέων φορτίου (π.χ. ας πάρουμε ηλεκτρόνια), η τάση Hall  $V_H$  υπολογίζεται από την δύναμη Lorentz

$$F = q(E + v \times B)$$

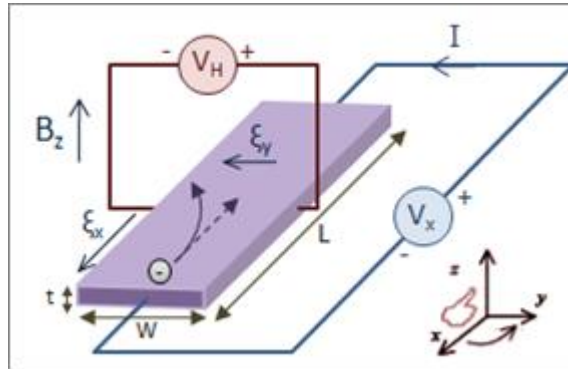


Το αρνητικό φορτίο αποκλίνει αρχικά (λόγω της μαγνητικής δύναμης) προς μια κατεύθυνση και άρα θα αρχίσει να συσσωρεύεται στο ένα άκρο (ενώ στο άλλο άκρο, λόγω έλλειψης ηλεκτρονίων θα συσσωρεύεται θετικό φορτίο ίδιου μεγέθους). Αυτό θα γίνεται για πολύ μικρή χρονική διάρκεια μέχρι να αποκατασταθεί η ηλεκτροστατική ισορροπία, κατά την οποία η συνισταμένη δύναμη ισούται με μηδέν (η ηλεκτρική

δύναμη που θα έχει τώρα φτιαχτεί εγκάρσια (λόγω του προαναφερθέντος ηλεκτρικού πεδίου Hall) αναιρεί την μαγνητική)

$$F_{ολ} = 0 \text{ και άρα } 0 = E_y - v_x B_z$$

$$\text{εν τέλη } E_y = v_x B_z$$



Επομένως το  $E_y$  όπως φαίνεται και στο σχήμα είναι εγκάρσιο του αρχικού ρεύματος  $I$  που εφαρμόστηκε στο σύστημα

Επίσης  $E_y = \frac{V_H}{L_y}$ , όπου  $L_y$  είναι το πλάτος του αγωγού. Άρα η τάση Hall θα ισούται με

$$V_H = u_x B_z L_y$$

Η ένταση του ρεύματος  $I_x$  ισούται με  $I_x = J_x L_y$

Μας είναι γνωστό πως

$$\mathbf{J} = -e\rho_e \mathbf{u} = e \left( \frac{N_e}{L_x L_y} \right) u_x$$

Άρα

$$I_x = e \left( \frac{N_e}{L_x} \right) u_x$$

Αντικαθιστώντας την  $u_x$  τώρα στην  $E_y$  βρίσκουμε ότι

$$E_y = \frac{B}{ceN_e} I_x L_x$$

Η τάση Hall ορίζεται ως

$$V_H = - \int_0^{L_y} E_y dy = -E_y L_y$$

$$V_H = - \frac{I_x}{ecn_e} B$$

Όπου  $n_e$  συμβολίζεται η επιφανειακή πυκνότητα των φορέων.

Επομένως η αντίσταση Hall δίνεται από τη σχέση

$$\rho_H = \frac{V_y}{I_x} = - \frac{B}{ecn_e}$$

Υποθέσαμε ότι οι φορείς φορτίου είναι τα ηλεκτρόνια. Σε περίπτωση που είναι οι οπές τότε τα πρόσημα αντιστρέφονται στο  $V_H$  και  $\rho_H$ .

## Κβαντικό Φαινόμενο Hall

### Πρόβλημα Landau

Για τη μελέτη του κβαντικού φαινομένου Hall [3] (που πειραματικά εμφανίζεται σε δισδιάστατα συστήματα) είναι χρήσιμο να ασχοληθούμε με την επίλυση του “προβλήματος Landau” [14]. Ο όρος αυτός αναφέρεται στη μελέτη της κίνησης φορτισμένου σωματιδίου (ελευθέρου) κινούμενου σε δισδιάστατο επίπεδο μέσα σε

κάθετο μαγνητικό πεδίο. Σε όλο το κεφάλαιο θα αγνοήσουμε το σπιν των σωματιδίων για να αγνοήσουμε τις επιπλοκές λόγω του φαινομένου Zeeman (που θα μπορούσαν να προστεθούν στη συνέχεια). Το μαγνητικό πεδίο που νιώθει το φορτισμένο σωματίδιο (κινούμενο στο επίπεδο  $xy$ ) είναι

$$\vec{B} = B\hat{z}$$

Όπως είναι γνωστό το μαγνητικό πεδίο περιγράφεται από την σχέση

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} = \partial_x A_y - \partial_y A_x$$

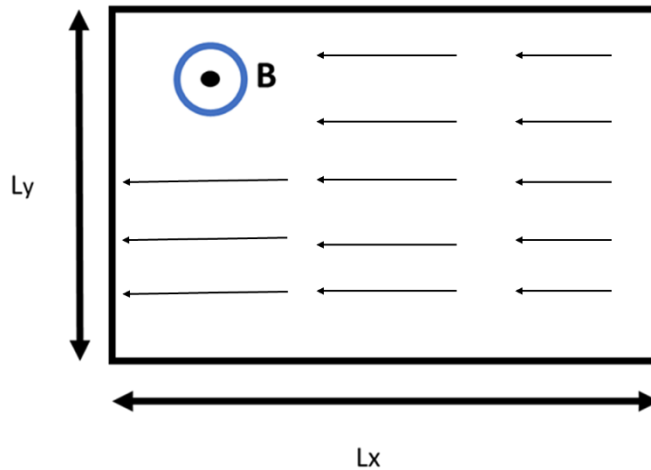
Η βαθμίδα που θα χρησιμοποιήσουμε είναι αυτή που πρώτος χρησιμοποίησε ο μεγάλος σοβιετικός φυσικός Lev Landau [14] και φαίνεται εξαιρετικά ιδιοφυής επιλογή εφόσον μπορεί να δώσει πλήρη λύση του προβλήματος και μάλιστα με μεγάλη ευκολία (ανάγοντάς το σε κάποιο πρόβλημα μονοδιάστατου ταλαντωτή) – κάτι που δεν ισχύει χρησιμοποιώντας άλλες συμμετρικές βαθμίδες

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r}$$

την οποία οι Fock και Darwin είχαν χρησιμοποιήσει νωρίτερα. Αυτή η βαθμίδα δίνει δύσκολες λύσεις, απ' όπου δεν φαίνονται εύκολα οι στάθμες Landau που θα δούμε παρακάτω.

Μια βαθμίδα Landau είναι μια βαθμίδα A που μένει αναλλοίωτη κάτω από μετατοπίσεις κατά μήκος μιάς ευθείας γραμμής. Μια τέτοια βαθμίδα (αναλλοίωτη κατά μήκος της x-διεύθυνσης, δηλ. υπο σταθερό y) είναι η

$$\vec{A} = (-By, 0, 0)$$



Η κινητική ορμή του ηλεκτρονίου (σε μονάδες SI)

$$\vec{\Pi} = \vec{p} - e\vec{A}$$

έχει τώρα x-συνιστώσα  $p_x - eA_x$ , επομένως το πρόβλημα έχει την ακόλουθη

Χαμιλτονιανή

$$\vec{H} = \frac{1}{2m} \left[ p_x - \frac{q}{c} (-By) \right]^2 + \frac{1}{2m} p_y^2$$

Το  $p_x$  είναι διατηρούμενη (conserved) ποσότητα (καλά ορισμένη) εφόσον δεν υπάρχει

η παράμετρος x μέσα στην Χαμιλτονιανή, δηλ.

$$[H, p_x] = 0$$

Αυτό σημαίνει ότι μπορούμε να ξέρουμε την ορμή του σωματιδίου με μηδενική αβεβαιότητα (και άρα, κατά την επίλυση της χρονοανεξάρτητης εξίσωσης Schrödinger μπορούμε να ψάξουμε για κοινές ιδιοσυναρτήσεις της  $H$  και της  $p_x$ ). Επομένως ψάχνουμε για τις  $\Psi_{k_x}(x, y)$  που ικανοποιούν

$$p_x \Psi_{k_x}(x, y) = \hbar k_x \Psi_{k_x}(x, y)$$

(η οποία προφανώς έχει λύσεις της μορφής  $\Psi_{k_x}(x, y) \sim \exp(i k_x x) f(y)$ )

μαζί με την εξίσωση Schrödinger  $H \Psi_{k_x}(y) = E \Psi_{k_x}(y)$ . Με χρήση της πάνω  $H$  μπορεί κάποιος να προσέξει κατευθείαν πως η  $f(y)$  ικανοποιεί μια effective μονοδιάστατη εξίσωση Schrödinger ενός αρμονικού ταλαντωτή που κινείται κατά την διεύθυνση  $y$  (με συχνότητα ίση με τη συχνότητα κύκλοτρο) και είναι μετατοπισμένος κατά  $y_0 = k_x l_B^2$  (όπου  $l_B$  το λεγόμενο μαγνητικό μήκος, βλ. κάτω). Πράγματι, μπορούμε να φέρουμε την χαμιλτονιανή σε πιο εμφανή μορφή (αρμονικού ταλαντωτή) ως εξής:

$$\widehat{H}_{k_x} = \frac{1}{2m} p_y^2 + \frac{1}{2} m \left( \frac{qB}{mc} \right)^2 \left[ y - \left( \frac{\hbar k_x}{qB} \right) \right]^2$$

$$\widehat{H}_{k_x} = \frac{1}{2m} p_y^2 + \frac{1}{2m} \omega (y - y_0)^2$$

με τον αρμονικό ταλαντωτή να έχει συχνότητα και κέντρο ταλάντωσης

$$Y_0 = -\frac{\hbar k_x}{qB} \quad , \quad \omega_c = -\frac{qB}{m}$$

Όπως γνωρίζουμε από τις λύσεις του αρμονικού ταλαντωτή το ενεργειακό φάσμα αποτελείται από διακριτές ενεργειακές στάθμες (ή επίπεδα) – στο συγκεκριμένο πρόβλημα θα τα ονομάσουμε επίπεδα (ή στάθμες) Landau – και είναι



$$E_{L.L} = \left( n_y + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c$$

όπου  $n_y = 0, 1, 2, 3, \dots$  ο λεγόμενος Landau level index. Μια μεγάλη διαφορά σε αυτό το πρόβλημα σε σχέση με έναν απλό μονοδιάστατο αρμονικό ταλαντωτή είναι, όπως θα δούμε στη συνέχεια, ότι εδώ κάθε στάθμη Landau είναι μακροσκοπικά εκφυλισμένη! (ενώ σε ένα μονοδιάστατο ταλαντωτή δεν έχουμε καθόλου εκφυλισμούς).

### Ιδιοσυναρτήσεις του προβλήματος Landau

Για την εύρεση των ιδιοσυναρτήσεων της χαμιλτονιανής  $H$ , οι οποίες όπως είδαμε μπορούν πάντα να έχουν τη μορφή

$$\Psi_{k_x}(y) = f(y)e^{ik_x x},$$

για την κατεύθυνση  $y$  η πλήρης μορφή λύση της  $f(y)$  θα είναι αυτή των συνηθισμένων ιδιοσυναρτήσεων ενός μονοδιάστατου ταλαντωτή, δηλ. (και εδώ παίρνουμε την περίπτωση ηλεκτρονίου  $q=-e$ )

$$f(y) \sim H_n \left( y - k_x l_B^2 \right) e^{-\frac{y - k_x l_B^2}{2l_B^2}},$$

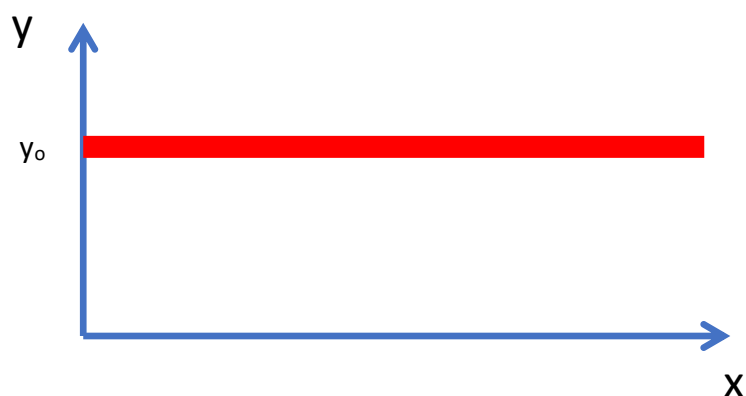
ή ισοδύναμα οι πλήρεις δισδιάστατες ιδιοσυναρτήσεις της  $H$  θα είναι

$$\Psi \sim e^{ik_x x} H_n \left( y - k_x l_B^2 \right) e^{-\frac{y - k_x l_B^2}{2l_B^2}}$$

(το  $\sim$  σημαίνει ότι παραλείπεται μια σταθερά κανονικοποίησης), όπου το  $l_B$  είναι το προαναφερθέν μαγνητικό μήκος και ισούται

$$l_B = \sqrt{\frac{\hbar}{m|\omega_c|}} \rightarrow l_B = \sqrt{\frac{\hbar}{|qB|}} = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}.$$

Οι παραπάνω λύσεις δεν είναι πολύ συμβατές με τη διαίσθησή μας (που προέρχεται από το αντίστοιχο κλασσικό πρόβλημα φορτίου μέσα σε μαγνητικό πεδίο), γι' αυτό θα ήταν παράληψη να μην δείξουμε σχηματικά πως “απλώνεται” στον χώρο μία τυπική κυματοσυνάρτηση.



Η κυματοσυνάρτηση μαζεύεται γύρω από το  $y_0$  αλλά είναι απλωμένη παντού στον άξονα  $x$ .

Συνεχίζοντας την προηγούμενη αναφορά μας στο ενεργειακό φάσμα, όταν π.χ. η ενέργεια βρίσκεται σε κάποιο επίπεδο Landau, αυτό το επίπεδο είναι άπειρα εκφυλισμένο (για άπειρο σύστημα) ή, όπως θα δούμε κάτω, έχει εκφυλισμό  $\frac{\Phi}{\Phi_0}$  για σύστημα με μακροσκοπικό αλλά πεπερασμένο εμβαδό  $S$  (όπου  $\Phi=BS$  η μαγνητική ροή που διαπερνά το δισδιάστατο σύστημα και  $\Phi_0$  το κβάντο ροής  $\Phi_0 = \frac{h}{e}$ ). Αυτός ο εκφυλισμός πηγάζει από το γεγονός ότι, παρόλο ότι οι κυματοσυναρτήσεις εξαρτώνται από το  $k_x$  (όπως φαίνεται από την πάνω σχέση), η ενέργεια δεν εξαρτάται από το  $k_x$  (παρά μόνο από τον Landau Level index  $n_y$ ).

Σε αυτή την περίπτωση όπου δεν λάβαμε υπόψιν ότι το εμβαδόν  $S$  είναι πεπερασμένο, ο εκφυλισμός είναι άπειρος. Τι γίνεται στην περίπτωση όπου οροθετούνται τα άκρα του δείγματός μας;

## Ο εκφυλισμός των καταστάσεων- Πεπερασμένη επιφάνεια S

Για να μελετήσουμε τον εκφυλισμό των επίπεδων Landau πρέπει να πάρουμε ένα πεπερασμένο πλαίσιο (π.χ. ορθογώνιο με πλευρές  $(L_x, L_y)$ ) με περιοδικές συνοριακές συνθήκες στην x-κατεύθυνση

$$x \rightarrow x + L_x$$

(και αυτό είναι δυνατό για τη συγκεκριμένη επιλογή βαθμίδας, μιάς και ισοδύναμα σημεία στις απέναντι κατακόρυφες πλευρές (δηλ. για το ίδιο  $y$ ) έχουν το ίδιο διανυσματικό δυναμικό  $\vec{A} = (-By, 0, 0)$  και άρα αυτή η τοπολογία κυλίνδρου είναι επιτρεπτή αφού το  $\vec{A}$  δεν έχει ασυνέχεια όταν οι απέναντι κατακόρυφες πλευρές συμπέσουν (“κολλήσουν”). Αποτέλεσμα της επιβολής τέτοιων συνοριακών συνθηκών είναι ότι οι τιμές του  $k_x$  είναι κβαντωμένες, δηλ.  $k_x L_x = 2\pi n_x$ , όμως ο ακέραιος  $n_x$  δεν μπορεί να πάει ως το άπειρο (πρέπει να έχει ένα άνω φράγμα), μιάς και το  $k_x$  δεν μπορεί να πάει στο άπειρο - αφού σχετίζεται με σχέση αναλογίας με τη θέση ισορροπίας  $y_0$  του ταλαντωτή η οποία πρέπει προφανώς να είναι πεπερασμένη, εφόσον πρέπει να βρίσκεται μέσα στον πεπερασμένο χώρο  $L_y$  του ορθογωνίου. Πράγματι, όπως είδαμε η θέση ισορροπίας των ιδιοκαταστάσεων στην y-διεύθυνση είναι  $y_0 = k_x l_B^2$  και πρέπει προφανώς να κείται στο διάστημα

$$0 < y_0 < L_y. \text{ Επομένως } k_x \leq \frac{L_y}{l_B^2}$$

Η πάνω μπορεί να λυθεί αμέσως ως ανίσωση ως εξής: Όταν βρισκόμαστε στο όριο  $\bar{k}_x L_x = 2\pi \bar{n}_x$  (όπου το  $y_0 = L_y$ ) τότε γίνεται εξίσωση, που μας δίνει τη μέγιστη τιμή  $\bar{n}_x$  (το άνω φράγμα) που πρέπει να έχει ο ακέραιος  $n_x$  (και αυτή η μέγιστη τιμή είναι που θα μας δώσει αμέσως το βαθμό εκφυλισμού της κάθε στάθμης Landau, μιάς και ο

αριθμότε όλων των διαφορετικών τιμών του  $n_x$  από 1 έως αυτή την τιμή είναι προφανώς  $n_x$ , και αυτές οι διαφορετικές τιμές δίνουν και διαφορετικές τιμές στο  $k_x$  και άρα αντιστοιχούν σε διαφορετικές ιδιοσυναρτήσεις που όλες έχουν την ίδια ενέργεια (αφού είπαμε ότι η ενέργεια δεν εξαρτάται από το  $k_x$ ) άρα το  $\bar{n}_x$  είναι ακριβώς ο βαθμός εκφυλισμού που ψάχναμε). Πάμε λοιπόν να το βρούμε:

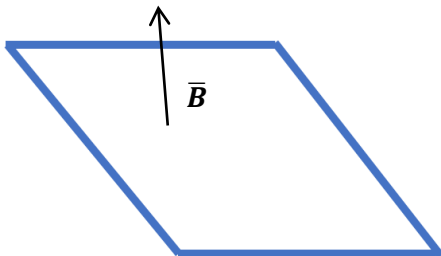
$$L_y = \bar{k}_x l_B^2 = \left( \frac{2\pi \bar{n}_x}{L_x} \right) l_B^2$$

$$\bar{n}_x = \frac{L_x L_y}{l_B^2} \frac{1}{2\pi} = \frac{AB}{\frac{2\pi \hbar c}{q}}$$

Ο εκφυλισμός, οι επιτρεπόμενες δηλαδή (διαφορετικές) καταστάσεις κάθε επιπέδου Landau (άρα με την ίδια ενέργεια) ισούνται με

$$\bar{n}_x = D = \frac{\Phi}{\Phi_0}$$

όπου  $\Phi$  είναι η ολική ροή που περνά μέσα από το σύστημα  $\Phi = BA$ , και  $\Phi_0$  ένα κβάντο ροής το οποίο ισούται με  $\Phi_0 \sim 4 * 10^{(-7)}$  gauss cm<sup>2</sup>. Ο εκφυλισμός όπως βλέπουμε εξαρτάται μόνο από το μαγνητικό πεδίο και την επιφάνεια του δείγματος

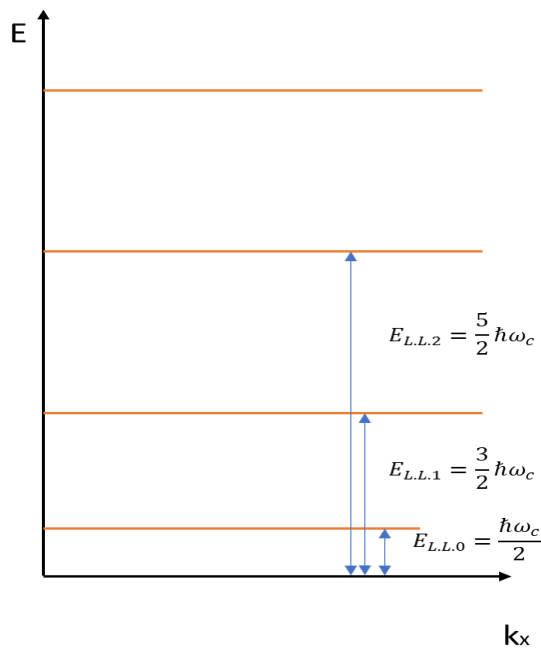


Για να δούμε την τάξη μεγέθους του εκφυλισμού παραθέτουμε το εξής χειροπιαστό παράδειγμα. Σε μια επιφάνεια 1cm<sup>2</sup> (Fig2) ο εκφυλισμός ισούται με

$$\frac{\Phi}{\Phi_0} = \frac{1 \text{ gauss cm}^2}{4 \cdot 10^{-7}} = 2.5 * 10^6 \text{ καταστάσεις}$$

που είναι μακροσκοπικός αριθμός. Ας δούμε τώρα τα επίπεδα Landau με τον πάνω πεπερασμένο αριθμό καταστάσεων.

Τα ενεργειακά επίπεδα Landau  $E_{L,L} = \left(n_y + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_c$  δεν εξαρτώνται ούτε από το κέντρο ταλάντωσης  $y_0$  ούτε από το  $k_x$  αλλά μόνο από το  $\omega_c$ .



Έχουμε βρει πως όλα τα Landau Levels είναι εκφυλισμένα με  $D = \frac{\Phi}{\Phi_0}$  καταστάσεις.

Δηλαδή κάθε ενεργειακή στάθμη έχει  $D$  θέσεις για να τις καταλάβουν τα ηλεκτρόνια.

### Παράγοντας κατάληψης-Filling Factor $\nu$

Ο παράγοντας κατάληψης ισούται με τον συνολικό αριθμό κατειλημμένων σταθμών

Landau. Για να τον βρούμε πρέπει να διαιρέσουμε τον ολικό αριθμό ηλεκτρονίων  $N$

του συστήματος με τον εκφυλισμό κάθε ενεργειακής στάθμης

$$\nu = \frac{N}{D}$$

Πυκνότητα καταστάσεων (ανα μονάδα επιφάνειας)

$$n_e = \frac{D}{L_x L_y} = \frac{eB}{hc}$$

Πόση επιφάνεια καταλαμβάνει κάθε μικροκατάσταση;

Από κάθε μικροκατάσταση περνάει ένα κβάντο ροής  $\Phi_0$ , επομένως μπορούμε να πούμε

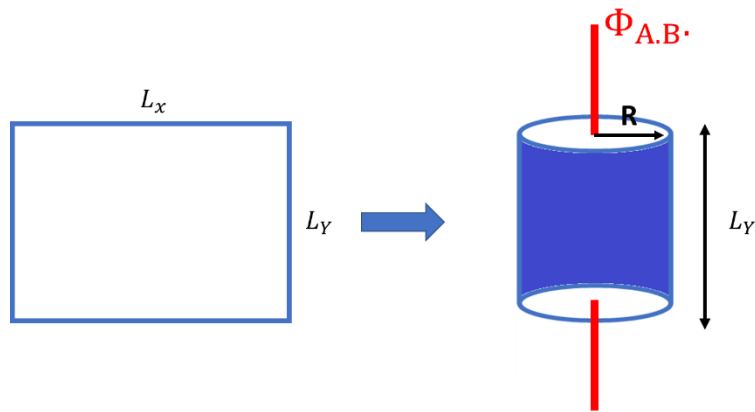
πως έχει επιφάνεια  $E_0 = 2\pi l_B^2$  και περνάει ροή  $\Phi = BA$  από όλο το σύστημα.

$$\frac{L_x L_y}{E_0} = \frac{\Phi}{\Phi_0} \mapsto E_0 = \frac{L_x L_y \Phi_0}{\Phi}$$

### Το επιχείρημα του Laughlin

Ο Laughlin ήταν ο πρώτος ο οποίος με μεγάλη διορατικότητα πολύ νωρίς – σχεδόν αμέσως μετά την ανακάλυψη του Q.H.E. - σκέφτηκε να παρομοιάσει το φαινόμενο με μια “τοπολογική αντλία” ηλεκτρονίων.

Στο πεπερασμένο πρόβλημα Landau έπρεπε να θέσουμε συνοριακές συνθήκες για να το λύσουμε. Ο Laughlin εκμεταλλευόμενος τις περιοδικές συνοριακές συνθήκες τύλιξε το σύστημα (2D) σε κύλινδρο για να περάσει δια μέσου αυτού μια ροή  $\Phi$  τύπου Aharonov-Bohm [13], μέσα από τον κενό χώρο του κυλίνδρου. Προσοχή! Η νέα ροή δεν έχει καμία σχέση με τη ροή ( $\Phi = BA$ ) που νιώθει στην επιφάνειά του το σύστημα λόγω του μαγνητικού πεδίου.

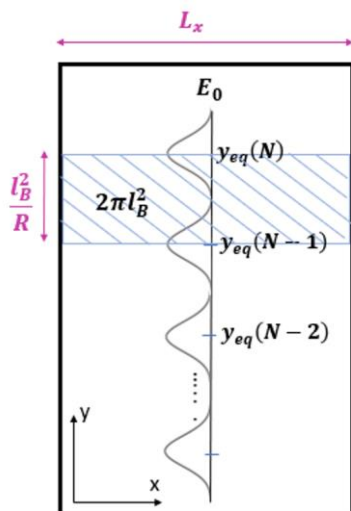


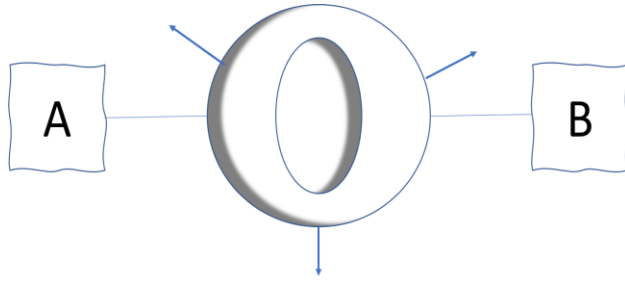
Η ακτίνα του κυλίνδρου θα ισούται με  $R = \frac{L_y}{2\pi}$ .

Υπενθυμίζουμε πως στο πρόβλημα Landau βρήκαμε πως τα κέντρα ταλάντωσης

ισούνται με  $y_0 = k_x l_B^2 = N \frac{2\pi}{L_x} l_B^2 = \frac{N l_B^2}{R}$ . Άρα κάθε κέντρο ταλάντωσης απέχει  $\Delta y =$

$\frac{l_B^2}{R}$  και οι καταστάσεις επεκτείνονται κατά το μήκος όλου του  $L_y$ .





Το κάθε άκρο (edge) του loop όπως φαίνεται στο πάνω σχήμα είναι ενωμένο με δύο ξεχωριστές ‘δεξαμενές’ ηλεκτρονίων. Καθώς η ροή  $\Phi$  που διαπερνά μέσα από το σύστημα αυξάνεται, δημιουργείται η Η.Ε.Δ. εξ Επαγωγής και λόγω του κλασσικού Hall effect έχουμε μετακίνηση ηλεκτρονίων από τη μια δεξαμενή στην άλλη. Το σύστημα έχει συμμετρία δαχτυλιδιού και περνά ροή μέσα από αυτό, κατά συνέπεια, ισχύει ένα αποτέλεσμα που προκύπτει από τη φυσική του φαινομένου Aharonov Bohn, όπου η χαμιλτονιανή είναι gauge invariant (και όλες οι φυσικές ποσότητες επιστρέφουν στις ίδιες τιμές) κάτω από αλλαγές κατά ακέραια πολλαπλάσια του  $\Phi_0$ . Δηλαδή, μετακινώντας ένα ηλεκτρόνιο από τη μια ‘δεξαμενή’ στην άλλη, το σύστημα φτάνει ξανά στην αρχική του κατάσταση.

Όπως θα δούμε στη συνέχεια αυξάνοντας τη ροή  $\Phi$  ανάμεσα στον κύλινδρο κατά ένα κβάντο ροής  $\Phi_0$  με αδιαβατικό τρόπο τότε, παρόλο που η χαμιλτονιανή του προβλήματος γυρίζει στον εαυτό της (up to a gauge!), οι ιδιοσυναρτήσεις έχουν αλλάξει - το πρόβλημα ανάγεται και πάλι σε αρμονικό ταλαντωτή αλλά με θέσεις ισορροπίας που έχουν μετατοπιστεί.

Πράγματι, το νέο διανυσματικό δυναμικό στην επιφάνεια του κυλίνδρου δίνεται απο

$$\vec{A} = -yB \hat{x} + \frac{\Phi_{AB}}{2\pi R} \hat{x}$$

εφόσον η νέα ροή (Aharonov-Bohn) που περνά από το σύστημα είναι:



$$\Phi = \oint \vec{A} \cdot d\vec{l} \rightarrow \Phi_{AB} = A2\pi R \rightarrow \vec{A} = \frac{\Phi_B}{2\pi R} \hat{\phi}$$

Συνεπώς, η νέα χαμιλτονιανή του προβλήματος θα είναι η ακόλουθη

$$\hat{H} = \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2m} \left[ p_x + \frac{e}{c} \left( -yB + \frac{\Phi}{2\pi R} \right) \right]^2$$

Αν ακολουθήσουμε τα ίδια βήματα για την επίλυση Schrödinger όπως κάναμε και για το κανονικό πρόβλημα Landau, η λύση θα είναι της μορφής

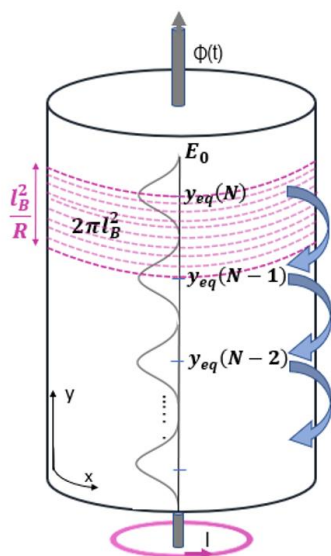
$$\frac{p_y^2}{2m} f_{k_x}(y) + \frac{1}{2m} \left[ p_x + \frac{e}{c} \left( -yB + \frac{\Phi}{2\pi R} \right) \right]^2 f_{k_x}(y) = E f_{k_x}(y)$$

με το νέο κέντρο ταλάντωσης να είναι το  $Y_{eq(\Phi)} = l_B^2 k_x - \frac{\Phi}{BL_x} = \left[ k_x + \frac{1}{R} \frac{\Phi}{\Phi_0} \right] l_B^2$ .

Αν αλλάξουμε τη ροή κατά  $\Phi_0$  τότε το νέο κέντρο ταλάντωσης ισούται με

$$Y_{eq(\Phi)} = \left[ k_x + \frac{1}{R} \frac{\Phi}{\Phi_0} \right] l_B^2 = \left[ \frac{2\pi n_x}{L_x} + \frac{1}{R} \right] l_B^2 = \frac{l_B^2}{R} [n_x + 1]$$

Συνεπώς όλα τα ηλεκτρόνια κάθε ενεργειακής στάθμης Landau (Landau level) μετακινούνται απόσταση ίση με το κέντρο ταλάντωσης  $\Delta y = y_0$ .



Η μεταβολή της μαγνητικής ροής κατά  $\Phi_0$  αντιστοιχεί στην μετακίνηση των κέντρων ταλάντωσης στο επόμενο κέντρο. Άρα τα ηλεκτρόνια κάθε στάθμης Landau κινούνται στην επόμενη στάθμη όπως φαίνεται και στο πιο πάνω σχήμα.

$$N\Delta y = g\nu\Delta y = \frac{\Phi}{\Phi_0} \nu \frac{l_B^2}{R} \rightarrow N\Delta y = \nu L_y$$

Όπως φαίνεται από την πιο πάνω σχέση, η μετακίνηση όλων των ηλεκτρονίων κατά ένα κέντρο ταλάντωσης ισοδυναμεί με την μεταφορά  $\nu$  ηλεκτρονίων κατά  $L_y$ . Γίνεται δηλαδή άντληση  $\nu$  ηλεκτρονίων από το ένα άκρο του κυλίνδρου μέχρι το άλλο. Ιδού λοιπόν και η αντλία ηλεκτρονίων.

Ας αξιοποιήσουμε τότε το προηγούμενο αποτέλεσμα: το ηλεκτρικό ρεύμα  $I_y$  ισούται με την μεταφορά  $\nu$  ηλεκτρονίων ανά χρόνο  $\tau$ . Επίσης η διαφορά δυναμικού που δημιουργείται κατά την περιφερειακή διεύθυνση  $x$  λόγω της ΗΕΔ του νόμου Faraday ισούται με

$$V_x = -\frac{1}{c} \frac{\Delta\Phi_{A,B}}{\Delta\tau} = -\frac{1}{c} \frac{\Phi_0}{\tau}$$

Και η αντίσταση στην κάθετη διεύθυνση ( $\rho_{xy}$ ) (αντίσταση Hall) ισούται με

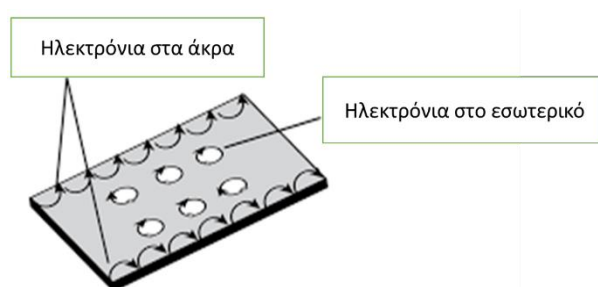
$$\rho_H = \frac{V_x}{I_y} = -\frac{\frac{1}{c} \frac{\Phi_0}{\tau}}{\frac{\nu e}{\tau}} \rightarrow \rho_H = -\frac{h}{\nu e^2}$$

που είναι συμβατό με τις παγκόσμιες τιμές που μετρήθηκαν πάνω στα πλατώ από τον Von Klitzing [4] (αλλά και από όλους από εκεί και μετά και σε διαφορετικά υλικά).

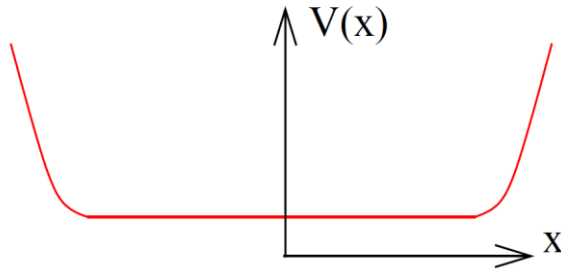
Το παραπάνω επιχείρημα του Laughlin ήταν προάγγελος αυτού που ξέρουμε σήμερα – ότι το Q.H.E. [4] οφείλεται ουσιαστικά σε ειδικές καταστάσεις άκρων (οι οποίες άγουν

ρεύμα χωρίς οπισθοσκέδαση! (παρακάμπτοντας τυχόν προσμίξεις κλπ.!) και οι οποίες έχουν όντως τοπολογική προέλευση.

### Καταστάσεις των άκρων



Η ύπαρξη καταστάσεων στα άκρα μπορεί να ιδωθεί και κλασικά. Όταν εφαρμόσουμε κάθετο μαγνητικό πεδίο σε ένα 2D σύστημα τα φορτισμένα σωματίδια κινούνται σε κυκλικές τροχιές. Τι γίνεται όμως με τα σωματίδια που βρίσκονται κοντά στις άκρες του συστήματος που δεν μπορούν να εκτελέσουν μια ολοκληρωμένη κυκλική στροφή αλλά ένα μόνο μέρος της (ας πούμε μισή); Τότε τα φορτισμένα σωματίδια αφού δεν μπορούν να βγουν έξω από το σύστημα εκτελούν μισή στροφή και μετά ακόμη μισή στροφή κ.ο.κ. Μακροσκοπικά αυτό μεταφράζεται σαν τοπικό ρεύμα εφόσον έχουμε συνεχή και προσανατολισμένη προς μια κατεύθυνση κίνηση φορτισμένων σωματιδίων. Οι καταστάσεις των άκρων μπορούν να δοθούν και από την κβαντική σκοπιά δίνοντας παρόμοιο αποτέλεσμα, όπως δείχνεται στη συνέχεια.



Για να μοντελοποιήσουμε τις καταστάσεις των άκρων πρέπει να εισαγάγουμε δυναμικό το οποίο αυξάνεται απότομα (π.χ. εκθετικά) στις άκρες του δείγματος όπως φαίνεται πιο πάνω. Εφόσον οι καταστάσεις του συστήματος είναι εντοπισμένες στην διεύθυνση  $x$ , και υποθέτουμε πως το δυναμικό αλλάζει πολύ αργά σε κλίμακα μαγνητικού μήκους  $l_B^2$ , μπορούμε να εφαρμόσουμε ανάπτυγμα Taylor γύρω από το κέντρο ταλάντωσης και να διώξουμε έτσι όλους τους σταθερούς όρους. Επομένως η χαμιλτονιανή θα γίνει της μορφής

$$H_{k_x} = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_B^2 (k_y l_B^2 + x)^2 + x \frac{dV}{dx}$$

Όπου το  $\frac{dV}{dx}$  αντιστοιχεί στο  $x_0 = k_y l_B^2$ . Η χαμιλτονιανή μπορεί να γραφτεί πιο αναλυτικά ούτως ώστε να είναι εμφανής ο αρμονικός ταλαντωτής συν ένας έξτρα όρος

$$H_{k_y} = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_B^2 \left( \left( k_y l_B^2 + \frac{dV}{dx} \frac{1}{m \omega_B^2} \right) + x \right)^2 - \frac{1}{2m \omega_B^2} \left( \frac{dV}{dx} \right)^2 - k_y l_B^2 \frac{dV}{dx}$$

Όλοι οι έξτρα όροι της χαμιλτονιανής εκτός από αυτούς του αρμονικού ταλαντωτή (πρώτος και δεύτερος) είναι σταθεροί ως προς το  $\hbar k_y$ , επομένως αυτοί οι όροι θα μετατραπούν σε ιδιοτιμές της ενέργειας

$$E_n(k_y) = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c - \frac{1}{2m \omega_B^2} \left( \frac{dV}{dx} \right)^2 - k_y l_B^2 \frac{dV}{dx}$$

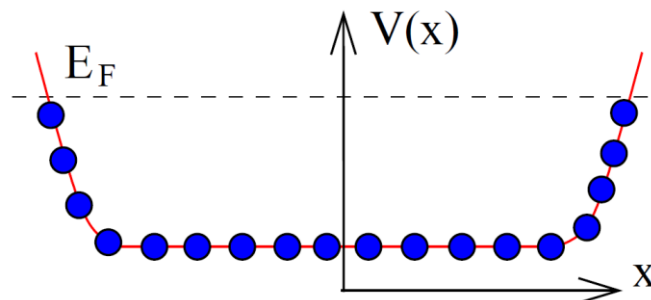
Η ενέργεια εξαρτάται μόνο από την  $p_y = \hbar k_y$ , έτσι μπορούμε να υπολογίσουμε μια πεπερασμένη ταχύτητα ομάδας των κυματοπακέτων

$$u_y = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk_y} = -\frac{1}{eB} \frac{dV}{dx}$$

Αν ξαναδούμε την εικόνα του δυναμικού και χρησιμοποιώντας το γεγονός ότι οι καταστάσεις είναι εντοπισμένες στον άξονα-x, μπορούμε να δούμε πως για τις καταστάσεις στο δεξιό άκρο (θετικό δυναμικό) η ταχύτητα ομάδας είναι αρνητική και στο αριστερό άκρο (αρνητικό δυναμικό) η ταχύτητα ομάδας είναι θετική.

Οι καταστάσεις αυτές των άκρων είναι χειραλικές (chiral), επομένως μπορούν να κινούνται μόνο σε μια κατεύθυνση.

Το σχήμα δείχνει το αυξανόμενο δυναμικό στα άκρα του δείγματος, ενώ τα μπλε



συμβολίζουν τα κέντρα ταλάντωσης της κυματοσυνάρτησης των καταστάσεων που καταλαμβάνονται μέχρι την ενέργεια Fermi  $E_F$ .

Εισάγοντας το ηλεκτροχημικό δυναμικό ανάμεσα στα δύο άκρα, μπορούμε να υπολογίσουμε το ρεύμα που δημιουργείται  $I_y$

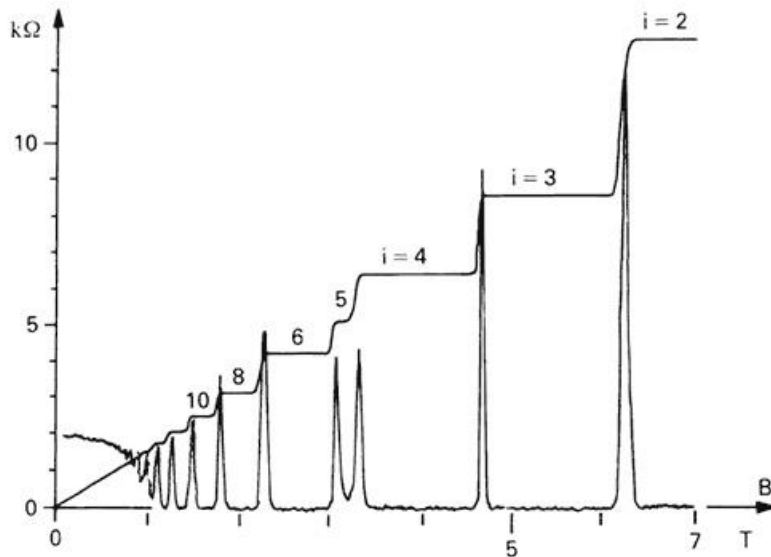
$$I_y = -\frac{e}{L_y} \int dk_y \frac{L_y}{2\pi} u_y(k_y) = \frac{e}{2\pi l_B^2} \int dx \frac{1}{eB} \frac{dV}{dx} = \frac{e}{2\pi\hbar} \Delta\mu$$

Στο ολοκλήρωμα λάβαμε υπόψιν ότι τα Landau Levels είναι πλήρως κατειλημμένα.

Σημειώνοντας πως η τάση Hall  $V_H$  του δείγματος δίνεται από την διαφορά χημικού

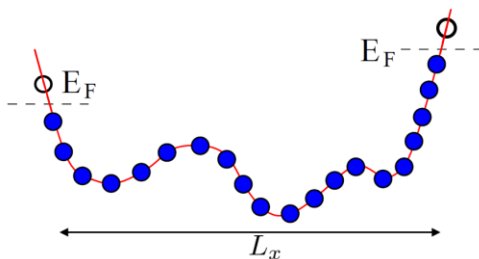
δυναμικού  $\Delta\mu$ , μπορούμε να βρούμε πως η αγωγιμότητα στο πρώτο πλατώ ( $n=0$ ) ισούται με

$$V_H = \frac{\Delta\mu}{e} \text{ αρα } \sigma_{xy} = \frac{I_y}{V_H} = \frac{e^2}{2\pi\hbar}$$



Το ίδιο πείραμα για την τάση Hall  $V_H$  μπορεί να εφαρμοστεί και για τα άλλα επίπεδα Landau και θα πάρουμε την αντίστοιχη αγωγιμότητα στα πλατώ.

Παρεμπιπτόντως το δυναμικό δεν χρειάζεται να έχει αυτή την ιδανική μορφή που είχε στην πιο πάνω εικόνα, δηλαδή να αυξάνεται μόνο στα άκρα, ωστόσο το αποτέλεσμα είναι το ίδιο.



Υπάρχει ακόμη μια σημαντική ιδιότητα των καταστάσεων των άκρων που ακόμη να την μελετήσουμε. Οι καταστάσεις των άκρων του συστήματός μας είναι ανεπηρέαστες σε σκεδάσεις λόγω προσμίξεων. Στην κλασσική εικόνα ωστόσο, όταν υπάρχουν

σκεδάσεις λόγω προσμίξεων, τα ηλεκτρόνια κινούνται σε τυχαίες κατευθύνσεις με αποτέλεσμα το ρεύμα να μειώνεται αισθητά.

Κβαντομηχανικά όμως, κάθε ηλεκτρόνιο καταλαμβάνει μόνο μια θέση (στο χώρο  $k$ ), άρα η μόνη θέση που μπορεί να καταλάβει το ηλεκτρόνιο λόγω σκέδασης, είναι μια κενή κατάσταση η οποία βρίσκεται πάνω από την ενέργεια Fermi και συμβολίζονται με μαύρους κύκλους. Άρα, αν ένα ηλεκτρόνιο από μια κατάσταση που βρίσκεται κάτω από την ενέργεια Fermi, μεταβεί σε υψηλότερες ενεργειακές καταστάσεις, το ρεύμα δεν αλλάζει εφόσον η αλλαγή είναι μηδαμινή μπροστά στη μακροσκοπική εικόνα.

Το πιο πάνω επιχείρημα φαίνεται πειστικό, ωστόσο, δεν δίνει καμιά εμφανή αιτία γιατί η αγωγιμότητα των πλατώ είναι σταθερή σε διακυμάνσεις του μαγνητικού πεδίου. Ο βαθύτερος λόγος είναι η τοπολογική φύση του φαινομένου και το γεγονός ότι η παρουσία των προσμίξεων βοηθούν στο κλείδωμα των κβαντωμένων τιμών της μαγνητοαντίστασης, θέμα όμως στο οποίο δεν θα δώσουμε συνέχεια σε αυτή την εργασία.

## Κεφάλαιο 3

### Κινηματική ορμή

Η κινηματική ορμή  $\mathbf{\Pi}$  ορίζεται ως η μετρήσιμη ποσότητα της ορμής ενός σωματιδίου (που όπως θα δούμε προκύπτει να είναι αναλλοίωτη κάτω από μετασχηματισμούς βαθμίδας (gauge invariant) και ίση με  $\mathbf{\Pi} = \mathbf{p}$ ), ενώ η πιο γνωστή (και με όλες τις καλές ιδιότητες συμμετρίας) κανονική ορμή  $\mathbf{p}$  γενικά δεν είναι. Σε Γκαουσιανές μονάδες

$$\mathbf{\Pi} = \mathbf{p} - \frac{q\mathbf{A}}{c}.$$

Για ένα κλασσικό σωματίδιο η δύναμη που ασκείται επάνω του είναι η δύναμη Lorentz στην οποία λαμβάνεται γενικά υπόψιν και το μαγνητικό πεδίο και το ηλεκτρικό

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{u} \times \mathbf{B}/c + \mathbf{E})$$

Στην κβαντομηχανική για να λάβουμε υπόψιν και τα δύο πεδία, πρέπει να εισαγάγουμε το διανυσματικό δυναμικό  $\mathbf{A}$  τέτοιο ώστε

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$$

$$\mathbf{E} = -\nabla V - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$

Η χαμιλτονιανή με την εισαγωγή του διανυσματικού δυναμικού για ένα ηλεκτρόνιο χωρίς σπίν θα είναι η ακόλουθη

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{\Pi}^2}{2m} + qV$$



Όπως έχουμε ήδη αναφέρει, η φυσική ποσότητα για την ορμή είναι το  $\mathbf{\Pi}$ , μπορούμε μάλιστα να αποδείξουμε πολύ εύκολα ότι  $\mathbf{\Pi} = m\mathbf{u}$  (όπου  $\mathbf{u}$  ο συνήθης τελεστής της ταχύτητας) με βάση το θεώρημα Ehrenfest, από το οποίο προκύπτει

$$\mathbf{u} = \frac{i}{\hbar} [\mathbf{H}, \mathbf{r}] = \frac{\mathbf{\Pi}}{m}$$

Μεταθετικές ιδιότητες της κινηματικής ορμής  $\mathbf{\Pi}$ :

Για να μελετήσουμε τις μεταθετικές ιδιότητες της κινηματικής ορμής θα χρειαστούμε τις ακόλουθες σχέσεις

$$[f(x, y, z), p_{x_i}] = i\hbar \frac{\partial f}{\partial x_i}$$

$$[x, f(p_x, p_y, p_z)] = i\hbar \frac{\partial f}{\partial p_{x_i}}$$

Χρειαζόμαστε τη σχέση μετάθεσης

$$[\Pi_x, \Pi_y] = [p_x - \frac{q}{c} A_x, p_y - \frac{q}{c} A_y]$$

Σύμφωνα με τις πιο πάνω σχέσεις

$$[\Pi_x, \Pi_y] = \frac{e}{c} ([p_x, A_y] + [A_x, p_y]) = -i\hbar \frac{e}{c} \left( \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right)$$

προκύπτει

$$[\Pi_x, \Pi_y] = -\frac{i\hbar e}{c} B_z$$

Ομοίως

$$[\Pi_z, \Pi_x] = -\frac{i\hbar e}{c} B_y$$

$$[\Pi_y, \Pi_z] = -\frac{i\hbar e}{c} B_x$$

Οι φαινομενικά αθώοι μετασχηματισμοί βαθμίδας

Στον ηλεκτρομαγνητισμό αποδεικνύεται σχετικά εύκολα πως με μετασχηματισμούς βαθμίδας των δυναμικών  $V$  και  $\mathbf{A}$ , τα πεδία  $\mathbf{E}$  και  $\mathbf{B}$  μπορούν να μένουν αναλλοίωτα

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\Lambda$$

$$V' = V - \frac{1}{c} \frac{\partial\Lambda}{\partial t}$$

Αυτή η ‘αθώα’ βαθμίδα ωστόσο είναι υπαίτια για την αλλαγή της κυματοσυνάρτησης στην κβαντομηχανική

$$\Psi \rightarrow \Psi' e^{\frac{iq\Lambda(r,t)}{\hbar}}$$

Ο αναγνώστης αν έχει αμφιβολίες μπορεί να αντικαταστήσει την πιο πάνω σχέση στην νέα εξίσωση Schrödinger

$$\mathbf{H}'\Psi' = \frac{1}{2m} \left( -i\hbar\nabla - \frac{q}{c}\mathbf{A}' \right)^2 \Psi' + qV'\Psi' = i\hbar \frac{\partial\Psi'}{\partial t}$$

### Αναλλοίωτο ρεύμα $\mathbf{J}$ και κινηματική ορμή $\mathbf{\Pi}$

Μπορούμε να δείξουμε πως το τοπικό κβαντομηχανικό ρεύμα μένει αναλλοίωτο με τους πάνω μετασχηματισμούς των δυναμικών πολλαπλασιάζοντας στο αριστερό μέρος της τελευταίας σχέσης την  $\Psi'$ , παίρνοντας έτσι το κβαντομηχανικό ρεύμα  $\mathbf{J}'$

$$\Psi' \frac{1}{2m} \left( -i\hbar\nabla - \frac{q}{c}\mathbf{A}' \right)^2 \Psi' + qV'\Psi' = \Psi' i\hbar \frac{\partial\Psi'}{\partial t}$$

Επίσης μπορούμε να αποδείξουμε πως και η κανονική ορμή  $\mathbf{P}$  (με την έννοια της οποιασδήποτε αναμενόμενης τιμής της) μένει αναλλοίωτη κάτω από τους πάνω μετασχηματισμούς βαθμίδας

$$\langle \Psi' | \mathbf{P}' | \Psi' \rangle = \langle \Psi | \mathbf{P} | \Psi \rangle$$

Αυτή η ιδιότητα, δηλαδή μεγέθη να παραμένουν αμετάβλητα κάτω από μετασχηματισμούς βαθμίδας, γενικεύεται σε ΟΛΑ τα φυσικά μεγέθη (η περίφημη gauge invariance).

### Μετασχηματισμοί βαθμίδας:

Πριν δούμε λίγο πιο προσεκτικά τους πάνω μετασχηματισμούς βαθμίδας πρέπει να ξαναθυμηθούμε τις εξισώσεις του Maxwell εφόσον περιγράφουν τη συμπεριφορά του ηλεκτρικού και μαγνητικού πεδίου  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{B}$ .

Απο το γεγονός ότι η απόκλιση του μαγνητικού πεδίου είναι μηδέν μπορούμε να εισαγάγουμε το διανυσματικό δυναμικό εφόσον  $\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{f}) = 0$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$$

Αρα και η προηγούμενη εξίσωση θα αλλάξει σε

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{((\nabla \times \mathbf{A}))}{t} \text{ και άρα } \nabla \times \left( \mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) = 0$$

$$\mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -\nabla V \text{ και τελικά } \mathbf{E} = -\nabla V - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$

Ο πάνω ορισμός για το ηλεκτρικό  $\mathbf{E}$  και μαγνητικό  $\mathbf{B}$  πεδίο μας δίνει την ευχέρεια να εισαγάγουμε τα βαθμωτά δυναμικά, δηλαδή δυναμικά  $A$  και  $V$  που αφήνουν το ηλεκτρικό και το μαγνητικό πεδίο αναλλοίωτα.

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \boldsymbol{\alpha}$$

$$V' = V + \beta$$

επιβάλλοντας αναλλοιότητα

$$\mathbf{B}' = \mathbf{B} \quad \nabla \times \boldsymbol{\alpha} = 0$$

$$\mathbf{E}' = \mathbf{E} \quad -\nabla\beta - \frac{d\boldsymbol{\alpha}}{dt} = 0$$

Από την  $\nabla \times \boldsymbol{\alpha} = 0$  μπορούμε να εκφράσουμε το  $\boldsymbol{\alpha}$  σαν συναρτήση μιας βαθμωτής συνάρτησης  $\Lambda$ ,  $\boldsymbol{\alpha} = \nabla\Lambda$

$$\nabla \left( \beta + \frac{1}{c} \frac{d\Lambda}{dt} \right) = 0$$

Με τη σειρά της η πάνω σχέση μας επιτρέπει να εξισώσουμε την ποσότητα στην παρένθεση με μια χωροανεξάρτητη ποσότητα  $\beta + \frac{1}{c} \frac{d\Lambda}{dt} = l(t)$ , αρα

$$\beta = l(t) - \frac{1}{c} \frac{d\Lambda}{dt}$$

Το  $l(t)$  μπορεί να απορροφηθεί και άρα

$$\beta = -\frac{1}{c} \frac{d\Lambda'}{dt}$$

Τώρα μπορούμε να γράψουμε τα δυναμικά μετασχηματισμένα, απαλείφοντας το  $l(t)$

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\Lambda$$

$$V' = V - \frac{1}{c} \frac{d\Lambda}{dt}$$

Τα δυναμικά αυτά για πολλά χρόνια αντιμετωπιζόνταν σαν μαθηματικά βοηθήματα χωρίς κάποια φυσική σημασία. Κυρίως το διανυσματικό δυναμικό, για το οποίο αρκετοί φυσικοί επιχειρηματολόγησαν για το κατά πόσο πρέπει να του αποδοθεί κάποια βαθύτερη σημασία (και η επιχειρηματολογία (και controversy) συνεχίζεται στις μέρες μας σχετικά με το πασίγνωστο πλέον φαινόμενο Aharonov-Bohm).

Χρησιμοποιώντας και πάλι

$$\Psi = f e^{\frac{iq}{\hbar c} \Lambda(r,t)} = \left( -i\hbar \nabla - \frac{q}{c} (A + \nabla \Lambda) \right) \left[ e^{\frac{iq}{\hbar c} \Lambda(r,t)} f \right]$$

$$\left( -i\hbar \nabla - \frac{q}{c} (A + \nabla \Lambda) \right)^2 \Psi e^{\frac{iq}{\hbar c} \Lambda(r,t)} = e^{\frac{iq}{\hbar c} \Lambda(r,t)} \left( -i\hbar \nabla - \frac{q}{c} A \right)^2 \Psi$$

$$\frac{1}{2m} e^{\frac{iq}{\hbar c} \Lambda(r,t)} \left( -i\hbar \nabla - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 \Psi + q \left( \mathbf{V} - \frac{1}{c} \frac{d\Lambda}{dt} \right) \Psi e^{\frac{iq}{\hbar c} \Lambda(r,t)} = i\hbar \frac{d}{dt} \left( \Psi e^{\frac{iq}{\hbar c} \Lambda(r,t)} \right)$$

$$\frac{1}{2m} e^{\frac{iq}{\hbar c} \Lambda(r,t)} \left( -i\hbar \nabla - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 \Psi + q V \Psi e^{\frac{iq}{\hbar c} \Lambda(r,t)} - \frac{q}{c} \Psi e^{\frac{iq}{\hbar c} \Lambda(r,t)} \frac{d\Lambda}{dt}$$

$$= i\hbar \frac{d\Psi}{dt} e^{\frac{iq}{\hbar c} \Lambda(r,t)} - \frac{q}{c} \Psi e^{\frac{iq}{\hbar c} \Lambda(r,t)} \frac{d\Lambda}{dt}$$

$$\left( \frac{1}{2m} \left( -i\hbar \nabla - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 \Psi + q V \Psi \right) e^{\frac{iq}{\hbar c} \Lambda(r,t)} = i\hbar \frac{d\Psi}{dt} e^{\frac{iq}{\hbar c} \Lambda(r,t)}$$

Να λοιπόν η χρονοεξαρτημένη εξίσωση Schrödinger με τον έξτρα παράγοντα φάσης.

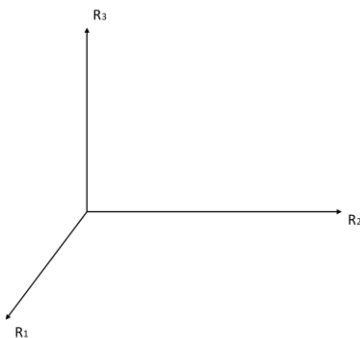
Συνοψίζοντας, η κυματοσυνάρτηση που προκύπτει κάτω από μετασχηματισμούς βαθμίδας κερδίζει μια επιπρόσθετη φάση

$$\Delta\varphi = \frac{q}{c\hbar} \Lambda(r, t)$$

## Κεφάλαιο 4: Berryology

### Θεωρία

Για να παρουσιάσουμε συνοπτικά τη φυσική τύπου Berry (μερικές φορές αυτό καλείται Berry-ολογία) θα δουλέψουμε στον χώρο των παραμέτρων (υποθέτοντας ότι η χαμιλτονιανή του συστήματός μας εξαρτάται από παραμέτρους). Για να διευκολύνουμε την αναπαράσταση θα υποθέσουμε ότι έχουμε μόνο 3 παραμέτρους ( $R_1, R_2, R_3$ ) όπου κάθε παράμετρος θα μπορούσε να έχει διαφορετικές μονάδες μέτρησης. Η χαμιλτονιανή εξαρτάται από όλες τις παραμέτρους και έτσι ορίζουμε ένα άνυσμα  $\mathbf{R}(t)$  με καρτεσιανές συνιστώσες αυτές τις παραμέτρους. Κάθε ένα σημείο στον χώρο των παραμέτρων αντιστοιχεί σε μία συγκεκριμένη τιμή που παίρνουν και οι τρεις παράμετροι.



Τις ιδιοκαταστάσεις (eigenkets) της χαμιλτονιανής, για κάθε συνδυασμό τιμών των παραμέτρων, ας τις συμβολίσουμε με  $|n(\mathbf{R})\rangle$ . Όταν η χαμιλτονιανή δράσει πάνω στις καταστάσεις αυτές δίνει ξανά το  $|n(\mathbf{R})\rangle$  αλλά πολλαπλασιασμένο με την αντίστοιχη ιδιοτιμή (eigenvalue), δηλ. την ενέργεια,

$$H(\mathbf{R})|n(\mathbf{R})\rangle = E_n(\mathbf{R}) |n(\mathbf{R})\rangle$$

Αυτό αντιστοιχεί με την λύση της χρονοανεξάρτητης εξίσωσης Schrödinger στον πραγματικό χώρο (χώρο των θέσεων  $\mathbf{r}$ ) για κάθε fixed τιμή των παραμέτρων  $\mathbf{R}$ , αλλά την ίδια στιγμή πρέπει να ικανοποιείται και η χρονοεξαρτημένη εξίσωση Schrödinger! (αν οι παράμετροι κινούνται,  $\mathbf{R}(t)$ ) - η πιο γενικά πρέπει να ικανοποιείται η θεμελιώδης εξίσωση χρονικής εξέλιξης

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = H(\mathbf{R})|\Psi(t)\rangle$$

Αν λοιπόν θεωρήσουμε ότι οι τιμές των παραμέτρων αλλάζουν με τον χρόνο

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}(t)$$

αλλά αργά-αργά (αδιαβατικά) για να είναι άμεσα χρήσιμη η λύση της χρονοανεξάρτητης εξίσωσης Schrödinger (για κάθε ενδιάμεση τιμή των παραμέτρων (ωσάν αυτές να είναι προσωρινά παγωμένες)), ταυτόχρονα με τη χρονοεξαρτημένη, και αν η αρχική κατάσταση είναι η  $|\Psi(0)\rangle = |n(\mathbf{R}(0))\rangle$ , τότε ποια είναι η χρονική εξέλιξη του  $|\Psi(t)\rangle$  ;

Αν η εξέλιξη είναι πολύ αργή, τότε το λεγόμενο αδιαβατικό θεώρημα μας λέει ότι η κατάσταση θα παραμείνει κλειδωμένη στην  $n$ th ιδιοκατάσταση (δηλ. δεν θα υποστεί μεταπτώσεις στην  $n+1$  ή σε άλλες), αλλά βέβαια θα αλλάζει ανάλογα με τη χρονική

εξέλιξη της  $n_{th}$  ιδιοκατάστασης (αφού αλλάζει στο χρόνο το  $\mathbf{R}(t)$ , αυτή θα γίνεται  $|n(\mathbf{R}(t))\rangle$ ). Δηλ. με άλλα λόγια στην αδιαβατική προσέγγιση περιμένουμε ότι  $|\Psi(t)\rangle = c |n(\mathbf{R}(t))\rangle$ , και αν χρησιμοποιήσουμε παντού κανονικοποιημένες καταστάσεις ( $\langle n|n\rangle=1$  για κάθε  $\mathbf{R}$ , καθώς και  $\langle \Psi|\Psi\rangle=1$ ) προκύπτει ότι ο μιγαδικός συντελεστής  $c$  πρέπει να έχει μέτρο μονάδα ( $|c|=1$ ) άρα πρέπει να είναι απλά ένας παράγοντας φάσης!

Ο Fock από την πρώτη δουλειά του γι' αυτό το σύστημα έγραψε πως οι κυματοσυναρτήσεις θα πρέπει να είναι της μορφής

$$|\Psi(t)\rangle = e^{i\delta_n R(t)} |n(\mathbf{R}(t))\rangle$$

$$\text{όπου } \delta_n = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(\mathbf{R}(t')) dt' \quad \text{η δυναμική φάση.}$$

Η δυναμική φάση γενικεύει την περίπτωση όπου δεν έχουμε καμιά αλλαγή στο σύστημα λόγω της μεταβολής του χρόνου, δηλαδή την περίπτωση στατικής Χαμιλτονιανής

$$\frac{dH}{dt} = 0$$

$$H|n\rangle = E_n(n)$$

Σε τέτοια περίπτωση, αν είχαμε  $|\Psi(0)\rangle = |n\rangle$  τότε απλά  $|\Psi(t)\rangle = e^{\frac{-iE_n t}{\hbar}} |n\rangle$ . Στο προηγούμενο όμως έχουμε χρονική εξέλιξη της  $H$ , αφού αυτή εξαρτάται από τα  $\mathbf{R}$  τα οποία με τη σειρά τους μεταβάλλονται με το χρόνο. Σε αυτή την πιο γενική περίπτωση, η πάνω δυναμική φάση που έγραψε ο Fock γενικεύει με προφανή τρόπο την πάνω απλή φάση (αφού απλά αν οι  $E_n$  δεν αλλάζουν με το χρόνο, τότε βγαίνουν έξω από το ολοκλήρωμα, και η δυναμική φάση γίνεται όντως ένα απλό γινόμενο  $-E_n t / \hbar$ ).



Όλος ο κόσμος μέχρι και το 1984 έτσι έλυνε τις χρονοεξαρτημένες Χαμιλτονιανές (στην αδιαβατική προσέγγιση). Αλλά έχασε κάτι πολύ σημαντικό από τον καιρό του Fock. Ότι ο συντελεστής  $c$  περιέχει γενικά, εκτός από την πάνω δυναμική φάση, και μια ακόμα φάση που έχει καθαρά γεωμετρική προέλευση – και όταν οι αδιαβατικές διαδικασίες είναι και κλειστές (loops στο χώρο των παραμέτρων) αυτή η νέα φάση είναι τελικά ανεξάρτητη της χρονικής διάρκειας της κλειστής διαδικασίας! (άρα είναι καθαρά γεωμετρική). Αυτά όλα μπορούν να βγούν (αν ονομάσουμε – όπως όλη η υφήλιος - τη νέα φάση  $\gamma_n$ ) από το

$$|\Psi(t)\rangle = e^{i\gamma_n(t)} e^{i\delta_n \mathbf{R}(t)} |n(\mathbf{R}(t))\rangle$$

Αντικαθιστώντας τώρα την νέα αυτή μορφή για την  $|\Psi(t)\rangle$  στους πάνω υπολογισμούς προκύπτει ότι

$$\dot{\gamma}_n = i \langle n | \dot{n} \rangle = i \langle n(\mathbf{R}(t)) | \frac{d}{dt} n(\mathbf{R}(t)) \rangle$$

$$\gamma_n(t) - \gamma_n(0) = \int_0^t i \langle n | \sum_{i=1}^3 \frac{dn}{dR_i} \rangle \cdot dR_i = \int_{R(0)}^{R(t)} i \langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}) \rangle \cdot d\mathbf{R}$$

Η ποσότητα που εμφανίζεται στο εσωτερικό γινόμενο στο πάνω αποτέλεσμα για την γεωμετρική αυτή φάση ονομάζεται Berry Connection

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{R}) = i \langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}) \rangle$$

Η  $\mathbf{A}_n$  παίζει το ρόλο κάποιου διανυσματικού δυναμικού ΑΛΛΑ στον χώρο των παραμέτρων  $\mathbf{R}$  (και το πάνω αποτέλεσμα δείχνει ότι η νέα γεωμετρική φάση γράφεται ως ένα επικαμπύλιο ολοκλήρωμα αυτού του διανυσματικού δυναμικού στο χώρο  $\mathbf{R}$ ). Αν λοιπόν κάνουμε ένα κλειστό loop στον χώρο των παραμέτρων βρίσκουμε ότι αυτή η φάση δίνεται από ένα κλειστό επικαμπύλιο ολοκλήρωμα αυτού του “διανυσματικού δυναμικού”, όπως είναι μια μαγνητική ροή στον πραγματικό χώρο (από το νόμο του

Stokes, όπως αυτός χρησιμοποιείται συνήθως στον Ηλεκτρομαγνητισμό), και μάλιστα αυτή φάση είναι και χρονικά ανεξάρτητη! (αφού, με την πάνω αλλαγή μεταβλητής, ο χρόνος έχει τελικά φύγει από το αποτέλεσμα, και το κλειστό επικαμπύλιο ολοκλήρωμα εξαρτάται μόνο από τις γεωμετρικές λεπτομέρειες του κλειστού δρόμου). Το αποτέλεσμα είναι λοιπόν

$$\gamma_n(C) = \oint \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R}$$

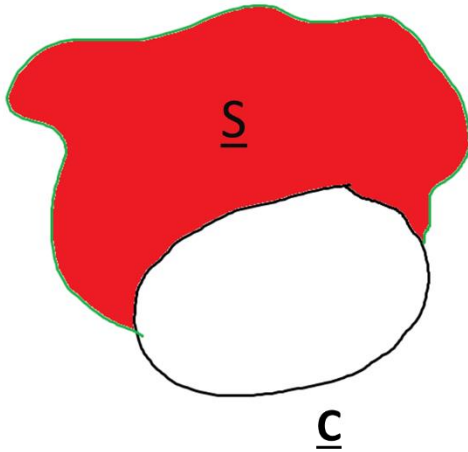
όπου  $C$  είναι η κλειστή διαδρομή.

Αυτή η φάση εκτός από γεωμετρική ονομάζεται και Berry Phase προς τιμή του Berry που την πρωτοείδε. Είναι ανεξάρτητη του χρόνου αλλά εξαρτάται από την διαδρομή που ακολουθήσαμε για να καλύψουμε το loop, σε αντίθεση με την δυναμική φάση που εξαρτάται άμεσα από τον χρόνο. Και είναι μια αληθινή (μετρήσιμη) ποσότητα, γιατί όπως θα δούμε παρακάτω είναι gauge invariant! (που θα δούμε ότι σημαίνει phase invariant), και δίνει στην ουσία σημαντικές πληροφορίες για μιά κρυμμένη γεωμετρία του χώρου των κβαντικών καταστάσεων (ουσιαστικά μια “κυρτότητα” του χώρου, με την κυρτότητα να είναι ουσιαστικά το “μαγνητικό πεδίο”, όπως θα δούμε, που σχετίζεται με το πάνω “διανυσματικό δυναμικό”).

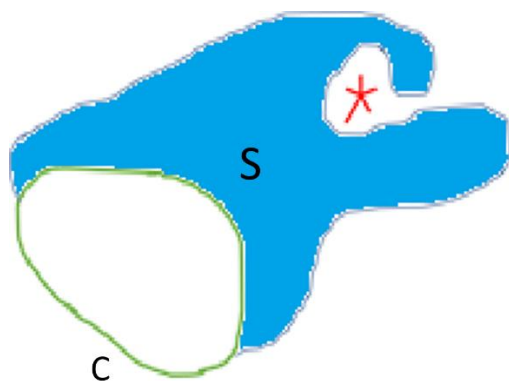
Πράγματι, αν εισαγάγουμε την έννοια της Berry Curvature  $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{R}) = \nabla \times \mathbf{A}_n(\mathbf{R})$  (με το  $\nabla$  να δρά βέβαια στο χώρο των παραμέτρων  $\mathbf{R}$ ) που είναι προφανώς και αυτή πραγματική ποσότητα, θα έχουμε ότι η φάση του Berry μπορεί επίσης να γραφτεί ως ένα επιφανειακό ολοκλήρωμα (μια “ροή”) πάνω σε μια τυχαία ανοιχτή επιφάνεια  $S$  η οποία έχει ως σύνορο την κλειστή διαδρομή  $C$ , δηλ.

$$\gamma_n(C) = \oint \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R} = \int (\nabla \times \mathbf{A}_n(\mathbf{R})) \cdot d^2R = \int_S \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{R}) \cdot d^2R$$

Πράγματι, για να βρούμε την Berry Phase πρέπει να κάνουμε επικαμπύλιο ολοκλήρωμα της Berry connection  $A$  κατά μήκος ενός συγκεκριμένου  $C$ , ή επιφανειακό ολοκλήρωμα της Berry curvature  $\Omega$  σε μια αυθαίρετη επιφάνεια με σύνορο το  $C$ .



Στα παραπάνω,  $S$  φαινομενικά μπορεί να είναι μια αυθαίρετη επιφάνεια, ΑΛΛΑ πρέπει να μην υπάρχουν γενικά στο χώρο των παραμέτρων μαγνητικά μονόπολα (singularities των  $A$  και  $\Omega$ ). (Ενώ γενικά τέτοιες singularities *υπάρχουν* όποτε έχουμε εκφυλισμούς (όποτε δηλ. ακουμπούν π.χ. οι ενέργειες  $E_n$  και  $E_{n+1}$  οπότε και παραβιάζεται η αδιαβατική προσέγγιση – παρόλα αυτά η πάνω θεωρία εξακολουθεί να ισχύει μακριά από αυτούς τους εκφυλισμούς και αυτές τις singularities!)



Αν περικλείονται μαγνητικά μονόπολα [10], επενεργεί κάποιος νόμος σαν τον νόμο του Gauss στον ηλεκτρισμό. Δηλαδή όταν κάνουμε το επιφανειακό ολοκλήρωμα δίνεται μια έξτρα συνεισφορά και το  $\gamma_n$  αλλάζει. Για να ισχύει λοιπόν η πάνω θεωρία, καλό είναι οι επιφάνειες που χρησιμοποιούμε να παρακάμπτουν κάπως αυτά τα μονόπολα, έτσι όπως φαίνεται στο πάνω σχήμα.

Πριν προχωρήσουμε, ας επισημάνουμε κάτι σημαντικό που μπορεί να μην είναι προφανές από τη μορφή των αποτελεσμάτων. Παρόλο που οι ορισμοί για τα  $\mathbf{A}$  και  $\mathbf{\Omega}$  περιέχουν τη μιγαδική ποσότητα  $i$ , το ερώτημα είναι *γιατί* αυτές οι ποσότητες - και άρα και η  $\gamma_n$  - είναι πάντα πραγματικές ποσότητες (με αποτέλεσμα, όπως θα δούμε στη συνέχεια να είναι και παρατήρησιμες! (observable)).

Αρκεί να αποδείξουμε ότι η ποσότητα  $\langle n | \dot{n} \rangle$  (ή ισοδύναμα το  $\langle n(R) | \nabla_R n(R) \rangle$ ) είναι καθαρά φανταστική (purely imaginary) ποσότητα, και έτσι (από τον πάνω ορισμό  $\mathbf{A}_n(R) = i \langle n(R) | \nabla_R n(R) \rangle$ ) προκύπτει αμέσως το ζητούμενο.

Για να το πετύχουμε αυτό θα χρησιμοποιήσουμε την κανονικοποίηση

$$\langle n|n \rangle = 1 \quad \forall \mathbf{R}(t)$$

$$\langle n(\mathbf{R}(t))|n(\mathbf{R}(t)) \rangle = 1 \text{ οπότε και η παράγωγος της ποσότητας } \frac{d}{dt} \langle n|n \rangle = 0$$

$$\langle \dot{n}|n \rangle + \langle n|\dot{n} \rangle = 0$$

Οι δύο όροι είναι μιγαδικοί συζυγείς. Θυμούμενοι ότι

$$z + z^\dagger = 2\text{Re}z$$

$$a + ib + (a - ib) = 2a$$

προκύπτει ότι το πραγματικό μέρος της ποσότητας  $\langle n|\dot{n} \rangle$  είναι πάντα μηδέν, ή με άλλα λόγια αυτή είναι καθαρά φανταστική.

Παρόμοια η ίδια ιδιότητα ισχύει εκτός από χρονικές παραγώγους και για παραγώγους ως προς τις παραμέτρους  $R_i$

$$\nabla \langle n|n \rangle = 0 \text{ αρα } \langle \nabla_R n|n \rangle + \langle n|\nabla_R n \rangle$$

$$2\text{Re} \langle n|\nabla_R n \rangle = 0$$

Άρα και το  $\langle n|\nabla_R n \rangle$  είναι purely imaginary. Επομένως η Berry connection είναι

$$A_n(R) = -\text{real} = -\text{Im} \langle n|\nabla_R n \rangle$$

Άρα και η  $\boldsymbol{\Omega}_n(R) = \nabla_R \times \mathbf{A}_n(R)$  είναι πάντα real με αποτέλεσμα και η φάση Berry να είναι σε κάθε πρόβλημα πραγματική ποσότητα.

Προκύπτει επίσης ότι η γεωμετρική φάση του Berry είναι παρατηρήσιμη ποσότητα, όπως φαίνεται και στα πιο σύγχρονα πειράματα [13] (εκτός από την θεωρία που παρατίθεται παρακάτω, που αφορά την gauge invariance αυτής της ποσότητας). Και αυτή η φάση του Berry εμφανίζεται και στο Κβαντικό Φαινόμενο Hall (όπως θα

αναφερθεί λίγο πιο κάτω), αλλά και σε όλες τις πρόσφατες τοπολογικές φάσεις (τοπολογικούς μονωτές και Dirac και Weyl ημιμέταλλα).

Πρώτα όμως ένα μικρό βήμα για να τηρήσουμε τις υποσχέσεις μας. Όπως ήδη αναφέρθηκε, το γεγονός ότι είναι πειραματικά μετρήσιμη ποσότητα οφείλεται στο ότι είναι gauge invariant. Ας δούμε τί ακριβώς σημαίνει αυτό:

Είναι γνωστό στην Κβαντομηχανική ότι έχουμε γενικά το δικαίωμα να πολλαπλασιάζουμε μια κατάσταση (ή και κυματοσυνάρτηση) με ένα παράγοντα φάσης χωρίς αυτό να αλλάζει τη φυσική του συστήματος. Άρα έχουμε το δικαίωμα να πολλαπλασιάσουμε με ένα παράγοντα φάσης τα eigenkets  $|n(\mathbf{R}(t))\rangle$  της πάνω θεωρίας Berry (και μάλιστα η έξτρα φάση που θα βάλουμε μπορεί γενικά να αλλάζει τοπικά με το  $\mathbf{R}$ ). Θα δούμε ότι αυτό οδηγεί ακριβώς στην ίδια διαδικασία με τους μετασχηματισμούς βαθμίδας, και έτσι – ακολουθώντας τα βήματα που δείξαμε νωρίτερα – θα μπορούμε να αποδείξουμε ότι η γεωμετρική φάση  $\gamma$  είναι gauge invariant (δηλ. παραμένει αναλλοίωτη κάτω από την εισαγωγή αυτών των αυθαίρετων φάσεων!).

Ιδού το πώς:

$$|n'(R(t))\rangle = |n(R(t))\rangle e^{i\Phi(R)}$$

Τότε

$$A'_n(R) = i \langle n'(R) | \nabla_R n'(R) \rangle$$

Εφαρμόζοντας τον κανόνα της αλυσίδας

$$\nabla_R n'^{(R)} = e^{i\Phi(R)} |\nabla_R n\rangle + i \nabla_R \Phi(R) e^{i\Phi(R)} |n(R)\rangle$$

$$A'_n(R) = i e^{-i\Phi(R)} \langle n(R) | \nabla_R n(R) \rangle e^{i\Phi(R)} - e^{-i\Phi(R)} \nabla_R \Phi(R) e^{i\Phi(R)} \langle n(R) | n(R) \rangle$$

όπου  $\langle n | n \rangle = 1$  η κανονικοποίηση, άρα μένει μόνο

$$A'_n(\mathbf{R}) = A_n(\mathbf{R}) - \nabla_r \phi(\mathbf{R})$$

$$\boldsymbol{\Omega}'_n(\mathbf{R}) = \nabla \times \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) - \nabla_r \times \nabla_r \phi = \nabla \times \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) = \boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{R})$$

Επομένως η  $\boldsymbol{\Omega}'_n(\mathbf{R})$  είναι gauge invariant όπως πρέπει, για να είναι το  $\gamma_n(\mathbf{R}) = \int_S \boldsymbol{\Omega}_A(\mathbf{R}) \cdot d^2R$  μετρήσιμη ποσότητα.

### Μαγνητικό Μονόπολο Dirac:

Όπως προαναφέρθηκε, υπάρχει περίπτωση εκφυλισμών σε κάποια σημεία του χώρου των παραμέτρων (διαφορετικές ενεργειακές στάθμες να ακουμπούν (ή και να έχουμε και crossover των ενεργειακών ζωνών)) σε αυτά τα σημεία. Τότε σε όλες τις ποσότητες Berry που ορίσαμε προηγουμένως θα έχουμε σε καθένα απο αυτά τα σημεία (πάντα στο χώρο των παραμέτρων) singularity, και αυτή προκύπτει να συμπεριφέρεται (και αυτό είναι ανακάλυψη του Berry στο αρχικό paper του 1984) σαν να υπάρχει στο χώρο των παραμέτρων ένα “μαγνητικό φορτίο” που φτιάχνει στον γύρω χώρο (των παραμέτρων πάντα) ένα σφαιρικά συμμετρικό “μαγνητικό πεδίο”. Μπορείτε να το φανταστείτε σαν το ανάλογο ηλεκτρικό φορτίο στον πραγματικό χώρο, που παράγει στο γύρω χώρο ηλεκτρικό πεδίο που μειώνεται με την απόσταση  $r$  σαν  $\sim 1/r^2$ . Παρόλο που τα πάνω συμβαίνουν στο χώρο των παραμέτρων  $\mathbf{R}$ , παρακάτω θα χρησιμοποιήσουμε συμβολισμό  $\mathbf{r}$  αντί για  $\mathbf{R}$  (ωσάν να έχουμε αληθινό χώρο των θέσεων), και  $\mathbf{B}$  (αληθινό μαγνητικό πεδίο) αντί για την Berry curvature  $\boldsymbol{\Omega}$  – ο λόγος είναι.. προς τιμήν του Dirac, ο οποίος σε “προϊστορικούς” καιρούς (1931!) έλυσε με

αυτούς τους συμβολισμούς αυτό το πρόβλημα (για ένα υποτιθέμενο σημειακό μαγνητικό φορτίο (μονόπολο) που είναι ακίνητο στην αρχή των αξόνων και δημιουργεί γύρω μαγνητικό πεδίο  $\mathbf{B}$ , ενώ σε όλο το γύρω χώρο κινείται κβαντικό ηλεκτρικό φορτίο, π.χ. ηλεκτρόνιο). Έχουμε λοιπόν, σε Γκαουσιανές μονάδες,

$$\mathbf{B} = \frac{q_m}{r^2} \hat{e}_r$$

Τότε η συνολική μαγνητική ροή  $\Phi_{ολ}$  που περνά από μια σφαίρα (δηλ. από μια κλειστή σφαιρική επιφάνεια κεντραρισμένη στην αρχή των αξόνων, δηλ. πάνω στο μονόπολο) ισούται με

$$\Phi_{ολ} = \iint_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = B S = B 4\pi r^2 = \frac{q_m}{r^2} 4\pi r^2 = 4\pi q_m$$

(αυτός ο συμβολισμός και αυτό το αποτέλεσμα θα χρησιμοποιηθεί αργότερα κάτω, για να βγεί αμέσως η κβάντωση του μαγνητικού φορτίου!). Ποιό είναι το  $\mathbf{A}$  που αναπαράγει το  $\mathbf{B} = \frac{q_m}{r^2} \hat{e}_r$ , που ικανοποιεί δηλ. την

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = \frac{q_m}{r^2} \hat{e}_r;$$

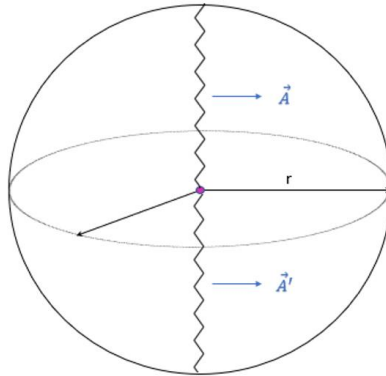
Αν το λύσουμε σε σφαιρικές συντεταγμένες θα βρούμε διάφορες μορφές (έτσι κι αλλιώς οι δυνατές μορφές για το  $\mathbf{A}$  είναι άπειρες – μόνο και από την άπειρη ελευθερία που έχουμε να αλλάζουμε βαθμίδα με gauge transformations), αλλά οι πιο απλές που προκύπτουν είναι αν ψάξουμε για  $\mathbf{A}$  που να έχει μόνο αζιμουθιακή (όχι ακτινική και όχι πολική) συνιστώσα. Θα βρούμε τότε 2 απλές (διαφορετικές) μορφές για την κατάλληλη βαθμίδα που αναπαράγει το πάνω  $\mathbf{B}$ , που είναι οι

$$(I) \quad \mathbf{A} = \frac{q_m(1 - \cos(\theta))}{r \sin\theta} \hat{e}_\varphi$$



$$(II) \quad \mathbf{A} = -\frac{q_m(1 + \cos(\theta))}{r \sin\theta} \widehat{e}_\varphi$$

Παρατηρούμε ότι το διανυσματικό δυναμικό  $\mathbf{A}$  δεν είναι αναλυτική συνάρτηση παντού, εφόσον αν πάρουμε  $\theta=0$  (στην II) το  $\mathbf{A}$  απειρίζεται, και στην (I) περίπτωση



απειρίζεται στο  $\theta=\pi$ .

Επομένως υπάρχει ένας προσανατολισμός στο χώρο (μια ευθεία) όπου υπάρχουν (κατανεμημένα με συνεχή τρόπο ως το άπειρο) όλα τα ανώμαλα σημεία του  $\mathbf{A}$  (η οποία κατανομή ονομάζεται Dirac string).

Και ενώ όπως είπαμε το  $\mathbf{A}$  δεν είναι μοναδικό (εφόσον πάντα μπορούμε να αλλάξουμε ένα οποιοδήποτε αρχικό  $\mathbf{A}$  σε  $\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\Lambda$ ), το  $\mathbf{B}$  είναι μοναδικό (όπως φαίνεται από το ότι  $\nabla \times \nabla\Lambda = 0$  για  $\Lambda$  μονότιμη συνάρτηση – δηλ. για “αθώο” (κανονικό) μετασχηματισμό βαθμίδας).

Ας μελετήσουμε λοιπόν την ροή που διαπερνά την σφαίρα που θεωρήσαμε πάνω. Μπορούμε να μοιράσουμε τη σφαιρική αυτή επιφάνεια (όχι τον όγκο της σφαίρας!) σε δυο ημισφαίρια και τότε θα περνάει ροή από το κάθε ένα

$$\Phi_{\text{πάνω}} = \iint_{S_{\text{πάνω}}} dS \cdot B = \oint_C A \cdot dl$$

$$\Phi_{\text{κάτω}} = \iint_{S_{\text{κάτω}}} dS \cdot B = -\oint_C A \cdot dl$$

(το πλήν στην κάτω οφείλεται στο διαφορετικό προσανατολισμό που έχει ένα μοναδιαίο άνυσμα (με κατεύθυνση προς τα έξω) σε σχέση με τη διαγραφή (sense) της διαδρομής C (η οποία σημειωτέον είναι η ίδια, συγκεκριμένη, και για τις 2 περιπτώσεις – ενώ η φορά των μοναδιαίων ανυσμάτων είναι ανάποδη για την πάνω και κάτω περιοχή)). Στις πάνω έχει βέβαια χρησιμοποιηθεί το Stokes Theorem για το ΚΟΙΝΟ (και για τις 2 περιοχές) σύνορο C. Έχουμε τότε για τη συνολική ροή

$$\Phi_{\text{ολ}} = \Phi_{\text{πάνω}} + \Phi_{\text{κάτω}} = \oint_C A \cdot dl - \oint_C A \cdot dl$$

Το  $\Phi_{\text{ολ}}$  είναι η διαφορά της ροής κατά μήκος του ίδιου loop, συνόρου των 2 περιοχών (πάνω και κάτω),

Επειδή λοιπόν στο πάνω αποτέλεσμα έχουμε διαφορά 2 φάσεων (κανονικά, στο χώρο των παραμέτρων, θα ήταν διαφορά 2 φάσεων Berry που δημιουργούνται από αδιαβατικό ταξίδι κατά μήκος του ίδιου loop!), αυτές οι 2 φάσεις θα έπρεπε αν είναι “οι ίδιες”. Αλλά επειδή μια φάση ορίζεται πάντα modulo  $2\pi$ , αυτό σημαίνει ότι η πάνω διαφορά πρέπει να είναι ίση – όχι κατ’ ανάγκη με μηδέν – αλλά με οποιοδήποτε ακέραιο πολλαπλάσιο του  $2\pi$ . Άρα συνάγουμε ότι

$$\frac{\Phi_{\text{ολ}}}{2\pi} = n$$

Προκύπτει λοιπόν – από ένα απλό τοπολογικό επιχείρημα - ότι η συνολική ροή που περνάει από την κλειστή σφαιρική επιφάνεια ΠΡΕΠΕΙ να είναι κβαντωμένη! (μάλιστα

θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί οποιαδήποτε άλλη κλειστή επιφάνεια, όχι κατ' ανάγκη σφαιρική – το επιχείρημα είναι ανεξάρτητο από γεωμετρικές λεπτομέρειες). [Και παρεμπιπτόντως, επειδή αυτή την  $\Phi_{ολ}$  την υπολογίσαμε προηγουμένως να είναι ίση με  $4\pi q_m$ , αυτό δίνει κάτι μη-τετριμμένο και τρομερά σημαντικό: το φορτίο  $q_m$  πρέπει να είναι κβαντωμένο!]

Εντελώς παρόμοιο επιχείρημα που χρησιμοποιήσαμε πάνω για το μαγνητικό μονόπολο μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε και στην Berry Connection  $\mathbf{A}_n(\mathbf{R})$  στον χώρο των παραμέτρων. Θυμίζουμε ότι είχαμε βρεί ότι η γεωμετρική φάση Berry είναι

$$\gamma_n(C) = \oint \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R}$$

Ακολουθώντας τη διαδικασία του Dirac, θεωρώντας το μετασχηματισμό βαθμίδας που μας πάει από το  $\mathbf{A}_I$  στο  $\mathbf{A}_{II}$  παίρνουμε

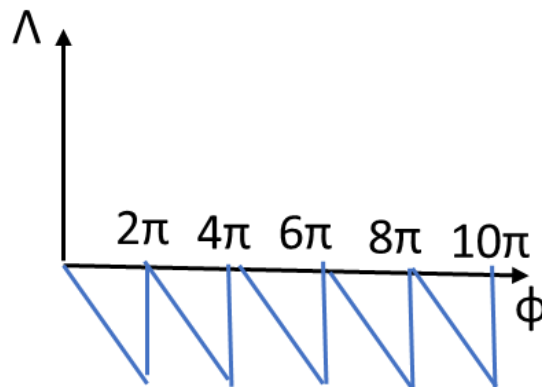
$$\mathbf{A}_{II} = \mathbf{A}_I + \nabla\Lambda$$

$$-\frac{q_m(1+\cos(\theta))}{r\sin\theta} \widehat{e}_\varphi = \frac{q_m(1-\cos(\theta))}{r\sin\theta} \widehat{e}_\varphi + \frac{1}{r\sin\theta} \frac{d\Lambda}{d\Phi} \widehat{e}_\varphi$$

$$-\frac{2q_m}{r\sin\theta} \widehat{e}_\varphi = \frac{1}{r\sin\theta} \frac{d\Lambda}{d\Phi} \widehat{e}_\varphi$$

$$\frac{d\Lambda}{d\Phi} = -2q_m, \text{ άρα } \Lambda = -2q_m\varphi$$

Το  $\Lambda$  θα έπρεπε να είναι συνεχής συνάρτηση της γωνίας, ή αλλιώς θα έπρεπε να είναι μονότιμο κάτω από ένα πλήρες αζιμουθιακό ταξίδι ( $\phi \rightarrow \phi + 2\pi$ ). Όμως δεν είναι (μας προέκυψε ότι είναι γραμμικό ως προς  $\phi$ ). Επιβάλλοντας εμείς τη μονοτιμία παρατηρούμε ότι εισάγει μια ασυνέχεια! (βλέπετε σχήμα), ας την πούμε  $\Delta\Lambda$ .



Αυτή η ασυνέχεια πρέπει να είναι μη-παρατηρήσιμη. Για να επιτευχθεί αυτό (a la Wu και Yang το 1975) είπαν ότι η κυματοσυνάρτηση καθώς γυρίζουμε αζιμουθιακά γύρω-γύρω πρέπει να ξαναφτάνει στον εαυτό της (και πριν και μετά το μετασχηματισμό), δηλ. και οι δύο πρέπει να είναι μονότιμες – και επειδή ήδη γνωρίζουμε ότι σχετίζονται μεταξύ τους μέσω της

$\Psi_{\text{μετά}} = \Psi_{\text{πριν}} e^{\frac{iq\Lambda}{\hbar}}$  από gauge transformation, όπου  $q$  το ηλεκτρικό φορτίο (του ηλεκτρονίου), αυτό σημαίνει ότι η πάνω ασυνέχεια  $\Delta\Lambda$  πρέπει να ικανοποιεί ότι

$$e^{\frac{iq\Delta\Lambda}{\hbar}} = 1 \quad \text{και αρα} \quad \frac{iq\Delta\Lambda}{\hbar} = 2\pi n$$

$$\frac{q}{\hbar c} (-2q_m 2\pi) = 2\pi n$$

$$qq_m = -\frac{n\hbar c}{4\pi}$$

Η σχέση αυτή αποτελεί τη συνθήκη κβάντωσης του Dirac, από την οποία προκύπτει η αναγκαιότητα της κβάντωσης του μαγνητικού (ή του ηλεκτρικού) φορτίου στη φύση). Πράγματι, η μαγνητική ροή μέσω από μια κλειστή (ας πάρουμε σφαιρική) επιφάνεια  $\Phi = BA$ , με χρήση του τύπου του μαγνητικού πεδίου είναι

$$\Phi = B(4\pi r^2) = 4\pi q_m = n\left(\frac{\hbar c}{e}\right),$$

Προκύπτει λοιπόν ότι η συνολική μαγνητική ροή είναι κβαντωμένη:  $\Phi = n\Phi_0$  και το κβάντο μαγνητικής ροής είναι το περιεχόμενο της παρένθεσης  $\Phi_0 = \left(\frac{\hbar c}{e}\right)$

Εάν κανείς χρησιμοποιήσει την κβάντωση του ηλεκτρικού φορτίου  $q_e = ne$  στη σχέση κβάντωσης του Dirac καταλήγει στην κβάντωση του μαγνητικού φορτίου, με κβάντο

$$q_m = \frac{\hbar c}{2|e|}$$

Ενώ αν κανείς πάρει ως γνωστό το μαγνητικό φορτίο του υποτιθέμενου μαγνητικού μονοπόλου προκύπτει η (γνωστή πειραματικά) κβάντωση του ηλεκτρικού φορτίου στη φύση (ότι δηλ. όλα τα ηλεκτρικά φορτία είναι  $q_e = ne$ ).

Ακέραιο Κβαντικό Φαινόμενο Hall από τοπολογική σκοπιά

Τι είναι ο αριθμός TKNN?

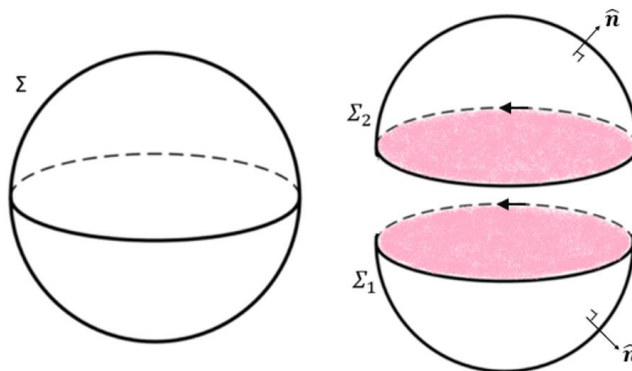
Ας θυμηθούμε αρχικά τι είναι η γεωμετρική φάση από τη συζήτηση της φάσης του Berry [8].

Είναι η γεωμετρική φάση που μαζεύεται από τις ιδιοσυναρτήσεις καθώς το ηλεκτρόνιο εκτελεί ένα loop στον χώρο των παραμέτρων και όπως είδαμε δίνεται από μια ροή της Berry curvature  $\Omega$ , δηλ.

$$\gamma_n = \oint \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{S}$$

Μπορούμε τώρα την επιφάνεια πάνω στην οποία ολοκληρώνουμε να την χωρίσουμε σε δύο μισά

$$\gamma_n = \oint_S^{\text{πάνω}} \boldsymbol{\Omega}_\pi(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{S} + \oint_S^{\text{κάτω}} \boldsymbol{\Omega}_K(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{S}$$



Χρησιμοποιώντας το θεώρημα Stokes

$$\gamma_n = \oint_C \mathbf{A}(\mathbf{R}(t)) \cdot d\mathbf{R} + (-\oint_C \mathbf{A}(\mathbf{R}(t)) \cdot d\mathbf{R})$$

Το αρνητικό πρόσημο στον 2ο όρο της Berry phase είναι συμβατό με την φορά των μοναδιαίων ανυσμάτων στα επιφανειακά ολοκληρώματα (σχήμα πάνω).

Η διαδρομή  $C$  κατά μήκος της οποίας ολοκληρώνουμε και τους δύο όρους είναι ίδια! εφόσον οι 2 περιοχές έχουν κοινό  $C$ .

Τα δύο ωστόσο επικαμπύλια ολοκληρώματα της  $\mathbf{A}$  (των οποίων η διαφορά δίνει τη φάση Berry στο πάνω αποτέλεσμα) δεν είναι κατά ανάγκη τα ίδια, αλλά γενικά διαφέρουν κατά ένα ακέραιο πολλαπλάσιο του  $2\pi$ . Το γιατί κρύβεται στους μετασχηματισμούς βαθμίδας, ή καλύτερα στο γεγονός ότι οποιαδήποτε φάση ορίζεται

$\text{mod}(2\pi)$ ), οπότε η πάνω διαφορά μεταξύ 2 “ίδιων” φάσεων πρέπει γενικά να έχει την τιμή

$$\gamma_n = C 2\pi$$

με  $C$  ακέραιο. Ο ακέραιος αυτός δίνεται από

$$C = \frac{\gamma_n}{2\pi} = \frac{1}{2\pi} \oint_S \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{S}$$

Αυτή η ακέραια σταθερά  $C$  ονομάζεται Chern number, και έχει πραγματικά την τιμητική του τις τελευταίες δεκαετίες.

Ο πάνω τύπος είναι προφανώς το ανάλογο του θεωρήματος Gauss-Bonnet της τοπολογίας: αλλά τώρα, αντί για την τοπική καμπυλότητα, έχουμε την Berry Curvature (και στη Στερεά Κατάσταση ονομάζεται θεώρημα Gauss-Bonnet-Chern). Αυτός ο ακέραιος αριθμός Chern παίρνει τιμές που είναι το ανάλογο των τιμών του ακεραίου  $n = 2(1 - g)$  στην τοπολογία όπως είδαμε προηγουμένως [12].

Το συμπέρασμα είναι ότι ο Chern number έχει τοπολογικό χαρακτήρα ο οποίος δεν επηρεάζεται από συνεχείς παραμορφώσεις και άλλες τοπικές αλλαγές του υλικού. Για ουσιαστικά αυτό το λόγο η αγωγιμότητα Hall έχει τεράστια σταθερότητα - και για να αλλάξει στην επόμενη κβαντωμένη τιμή θα πρέπει να υπάρξει μεγάλη διαταραχή (ή άλλη μεγάλη μεταβολή) στο σύστημα, όπως να αυξήσουμε υπέρμετρα το μαγνητικό πεδίο (όπως είχαμε δείξει σε προηγούμενο σχήμα).

Το πάνω αποτέλεσμα (της παρουσίας του αριθμού Chern στην αγωγιμότητα Hall για το Κβαντικό Φαινόμενο Hall) πρωτοεμφανίστηκε στη βιβλιογραφία το 1982 από τους Thouless et al. [15] με απευθείας υπολογισμό (βασισμένο σε θεωρία διαταραχών) – για αυτό και ο πάνω αριθμός Chern είναι επίσης γνωστός και ως αριθμός TKNN.

## Βιβλιογραφία

- [1] C. L. Kane, «Topological Insulators» physicsworld.com, 2011.
- [2] J. E. Moore, "The birth of topological insulators," Nature, vol. 464, 2010.
- [3] D. Tong, "The Quantum Hall Effect", Lectures on the Quantum Hall Effect, University of Cambridge, 2016.
- [4] K. v. Klitzing *et al.*, "New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized hall resistance", Phys. Rev. Lett. 45, 494–497 (1980).
- [5] B. I. Halperin, "Quantized Hall conductance, current-carrying edge states, and the existence of extended states in a two-dimensional disordered potential", Phys. Rev. B 25, 2185–2190 (1982).
- [6] D. J. Griffiths, "Introduction to quantum mechanics", Second Edition, (2005).
- [7] R. Shankar, "Topological insulators: A review", (2018).
- [8] M.V. Berry, "Quantal phase factors accompanying adiabatic changes", Proceedings of the Royal Society of London A 392, 45–57 (1984)
- [9] R. Resta, "Geometry and topology in electronic structure theory" (2016).
- [10] P. A. M. Dirac, "Quantised Singularities in the Electromagnetic Field", Proceedings of the Royal Society of London Series A 133, 60-72 (1931).
- [11] G. Tkachov, "Topological insulators: The physics of spin helicity in quantum transport", (2016).
- [12] M.-C. Chang, "Lecture notes on topological insulators" (2016).
- [13] Eliahu Cohen *et al.*, "Geometric phase from Aharonov–Bohm to Pancharatnam–Berry and beyond", Nature Reviews Physics vol. 1, 437–449 (2019)
- [14] Landau, L. D. (1930). Diamagnetism of Metals. Zeitschrift für Physik, 64(9-10), 629-637; or see Landau, L. D., & Lifshitz, E. M., (1981). Quantum Mechanics; Non-relativistic Theory. 3rd edition. Butterworth-Heinemann. pp. 424-426
- [15] D. J. Thouless, M. Kohmoto M. P. Nightingale and M. den Nijs, "Quantized Hall conductance in a two-dimensional periodic potential", Phys. Rev. Lett. 49, 6 (405 1982).
- [16] D. J. Griffiths, "Εισαγωγή στην ηλεκτροδυναμική" Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης
- [17] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin "Solid State Physics", Saunders College Publishing 1976