



Universiteit
Leiden
The Netherlands

The symmetry of crystals and the topology of electrons

Slager, R.J.

Citation

Slager, R. J. (2016, January 12). *The symmetry of crystals and the topology of electrons*. Retrieved from <https://hdl.handle.net/1887/37232>

Version: Corrected Publisher's Version

License: [Licence agreement concerning inclusion of doctoral thesis in the Institutional Repository of the University of Leiden](#)

Downloaded from: <https://hdl.handle.net/1887/37232>

Note: To cite this publication please use the final published version (if applicable).

Cover Page



Universiteit Leiden



The handle <http://hdl.handle.net/1887/37232> holds various files of this Leiden University dissertation.

Author: Slager, Robert-Jan

Title: The symmetry of crystals and the topology of electrons

Issue Date: 2016-01-12

Samenvatting

Theoretische natuurkunde als wetenschap tracht de rijkdom aan fysische fenomenen om ons heen te vatten in universele wiskundige vergelijkingen, die desalniettemin zo minimalistisch mogelijk zijn. De diepgaande schoonheid van dergelijke mathematische structuren wordt dan ook veelal gereflecteerd in hun toepasbaarheid op verschillende vraagstukken, al dan niet door middel van zogenaamde dualiteiten. Dit is niet in de laatste plaats het geval voor het deelgebied van de gecondenseerde materie, waar de beschrijvingen van emergente systemen die bestaan uit astronomische hoeveelheden deeltjes (waar men moet denken aan getallen in de orde van 10^{26}) vaak direct contact maken met de bekende fundamentele ijk- en zelfs snaartheorieën.

Vanuit een traditioneel oogpunt vinden de bovengenoemde analyses vaak hun oorsprong in algemene *symmetrieoverwegingen*. Daarnaast werd het in de jaren tachtig, voornamelijk met de ontdekkingen omtrent de kwantum Hall effecten, duidelijk dat zelfs begrippen vanuit het vakgebied van de *topologie* een bepalende rol kunnen spelen in de karakterisering van collectieve kwantummechanische gedragingen. Specifiek refereert topologie hier naar een tak van wiskunde die zich grofweg bezig houdt met de studie van vormen en ruimten; objecten die in dezelfde topologische klasse zitten, kunnen in elkaar vervormd worden door ze te buigen en op te rekken zonder te knippen of te plakken. Recentelijk is er echter juist interessante progressie geboekt door bestudering van de *samenhang* van de bovengenoemde a priori ongerelateerde benaderingen. Dit heeft in het bijzonder geleid tot de vinding van een tienvoudig mathematisch raamwerk, dat eenduidig alle mogelijke topologische toestanden van een willekeurig dimensionaal vrij-elektronsysteem in de aanwezigheid van een bepaalde discrete symmetrie uittelt.

Een hoogtepunt van deze ontwikkelingen wordt gevormd door de theoretische voorspelling en experimentele verificatie van het concept van de topologische band isolator. In een topologische isolator vormen de elektronen, net als in een normale isolator, een

incompressibele bandenstructuur, die evenwel een topologische identiteit heeft. Heuristisch gesproken betekent dit dat de elektrongolffuncties een onontwarbare knoop vormen die topologisch gezien niet tot een triviaal spectrum kan worden vervormd zolang de bepalende tijdsymmetrie (T-symmetrie) wordt gerespecteerd. Dit heeft verstrekkende fysische consequenties. Zo wordt een topologisch isolerend kristal gekenmerkt door onverwoestbare geleidende toestanden op de rand en bieden zulke topologische materialen bovendien de mogelijkheid tot de creatie van bijzondere majorana deeltjes, die ten grondslag zouden kunnen liggen aan de realisatie van de kwantumcomputer.

In dit proefschrift worden dergelijke structuren onderzocht vanuit een alternatief perspectief dat zich richt op de fundamentele aspecten van de onderliggende kristalsymmetrie. Het is namelijk een gegeven dat de bekende classificatieschema's, zonder uitzondering, berusten op de aanname dat de topologische variëteit van relevante momentum variabelen een torus betreft. In het bijzonder impliceert zo'n gedefiniëerde Brillouin zone via Blochs theorema het bestaan van een onderliggend rooster, waarvan de symmetrie wordt beschreven door een bijbehorende ruimtengroep. Een essentieel resultaat in dit proefschrift betreft dan ook een expliciete uitbreiding van het tienvoudige raamwerk met een classificatie die deze ruimtengroepsymmetrieën op natuurlijke wijze incorporeert. Bovendien worden deze resultaten fysisch inzichtelijk gemaakt door de bestudering van het rijke samenspel tussen deze beschrijving en de universele topologische defecten die de breking van de translatiesymmetrie van de vrije ruimte karakteriseren, te weten roosterdislocaties.

Na een bondige introductie, vangen wij deze queeste in hoofdstuk drie aan middels bestudering van het vereenvoudigde probleem van een π -flux dragende vortex in een twee-dimensionale (2D) topologische band isolator. Dit vraagstuk blijkt in de effectieve veldentheoretische benadering analytisch oplosbaar en we vinden dat zo'n vortex speciale nul-energie toestanden bindt. Deze toestanden herbergen rijke fysica an sich. Zo vertoont het emergente Kramers paar een scheidingsfenomeen van spin en lading; de excitaties dragen, afhankelijk van welke toestanden zijn opgevuld, *ofwel* spin *ofwel* lading relatief tot het vacuüm. Desalniettemin komen deze beschouwingen pas echt tot leven in het geval van dislocaties. We tonen namelijk aan dat, indien aan bepaalde voorwaarden wordt voldaan, roosterdislocaties in topologische band isolatoren kunnen worden opgevat als *effectieve* (π -) *fluxen* in een geometrische zin. Aangezien deze specifieke voorwaarden dus leiden tot verschillende responsen binnen dezelfde topologische klasse, duidt dit stante pede op het bestaan van de geanticiperde subclassificatie.

Dit idee wordt vervolgens wiskundig geformaliseerd in hoofdstuk vier en leidt zodoende tot een *ruimtegroep classificatie van topologische band isolatoren*. Hoewel deze beschouwing aangeeft dat er 18 2D en, op zijn minst, 70 verschillende 3D topologische isolerende fasen mogelijk zijn, identificeert dit schema bovendien 3 algemene klassen;

- (I) Γ -fasen,
- (II) Translationele actieve fasen,
- (III) Kristallijne fasen.

De eerste twee categorieën zijn topologisch niet-triviaal in de zin van het genoemde tienvoudige raamwerk en vinden een bescherming in de vorm van de onderliggende T-symmetrie. Nochtans is er wel degelijk een verschil aangezien alleen representanten van de translationele actieve klasse dislocatietoestanden binden en dus ontvankelijk zijn voor roosterwanorde. De laatstgenoemde kristallijne groep wordt zelfs uitsluitend beschermd door de bepalende ruimtegroepsymmetrie. Tenslotte worden deze bevindingen ook nog belicht vanuit het perspectief van de Greense functies. In bijzonder vinden we dat de gevonden topologische structuur direct samenhangt met de aanwezigheid van nulpunten van de gereduceerde Greense functie op bepaalde doorsneden van de Brillouin zone.

Met de ruimtegroeppordering van topologische fasen in handen, grijpen we vervolgens in hoofdstuk vijf terug op het responsmechanisme van dislocaties in drie ruimtelijke dimensies. Aangezien dislocatiedefecten in dit geval lijnen vormen, mag men verwachten dat deze beschouwing een grotere veelzijdigheid vertoont. Dit vermoeden wordt inderdaad gestaafd. Bovendien blijken deze resultaten natuurlijk onder een noemer te brengen met de gevonden classificatie, hetgeen ons primair voor ogen stond. Sterker nog, de uitkomsten kunnen worden verenigd in één simpele regel, die we bestempelen als de **K-b-t**-regel. Deze regel relateert zodoende de elektronische bandtopologie, beschreven door een effectief momentumpunt **K**, eenduidig met de onderliggende roostertopologie, welke gerepresenteerd wordt door dislocatielijnen met Burgersvector **b** en richtingsvector **t**.

Tenslotte besluiten we in hoofdstuk zes met een expliciete toepassing van de opgedane inzichten in de vorm van een studie rond zogenoemde korrelgrenzen in translationele actieve topologische materialen. Dergelijke oppervlakken ontstaan op breuklijnen tussen twee polykristallijne structuren en vormen een natuurlijke bron van dislocatienetwerken. Derhalve vertaalt dit vraagstuk zich direct naar een algemeen hybridisatiepro-

bleem van de eerder gevonden spin-lading gescheiden toestanden. Als gevolg van de, al dan niet emergente, symmetrieën resulteert dit vervolgens *op algemene gronden* in een *exotische semi-metallische bandenstructuur*, die veel raakvlakken heeft met het populaire grafeen en de recent ontdekte Weyl semi-metalen. Bovendien opent deze vinding een experimenteel toegankelijke route naar vele diepe natuurkundige fenomenen, waaronder verificatie van een illustere veldentheoretische anomalie en een expliciete manier om de oppervlaktetoestanden van de omvattende topologische isolator te manipuleren. Vanuit een breder perspectief gezien, sterken deze vele experimentele en theoretische implicaties dan ook onze overtuiging dat de bovengenoemde resultaten een interessante agenda kunnen vormen voor onderzoek in de nabije toekomst.