Bulk-edge korrespondencia
TMDCk
Berry görbület
Élállapotok
Jövőbeni kilátások
Hivatkozások

Élállapotok átmenetifém-dikalkogenidekben

Zsurka Eduárd, Rakyta Péter, Cserti József

Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék, ELTE

2019. április 26.

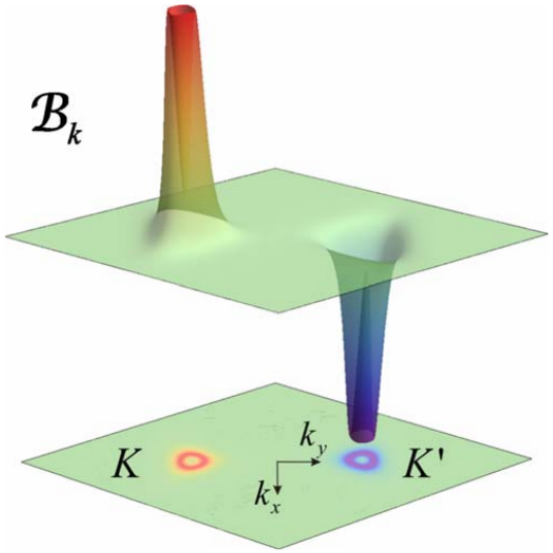
Bulk-edge korrespondencia

Berry görbület

- vezetési jelenségek szempontjából releváns mennyiség
- integrálja az egész BZ-ra a Chern szám

Bulk-edge korr.: nem nulla Chern szám → élállapotok a minta szélén

- Időtükrözés
  invariáns rendszer: Chern szám 0
- A Brillouin zónának vannak
  olyan részei ahol a Berry görbület nagy
- nagy Berry görbület → élállapotok



Kétrétegű grafén: a minta szélének alakja
határozza meg az élállapotok számát. [1]

TMDC mintákban megvizsgáltuk:

- Berry görbület és élállapotok

[1] Marginality of bulk-edge correspondence for single-valley Hamiltonians, Phys. Rev. B 82, 245404 (2010)

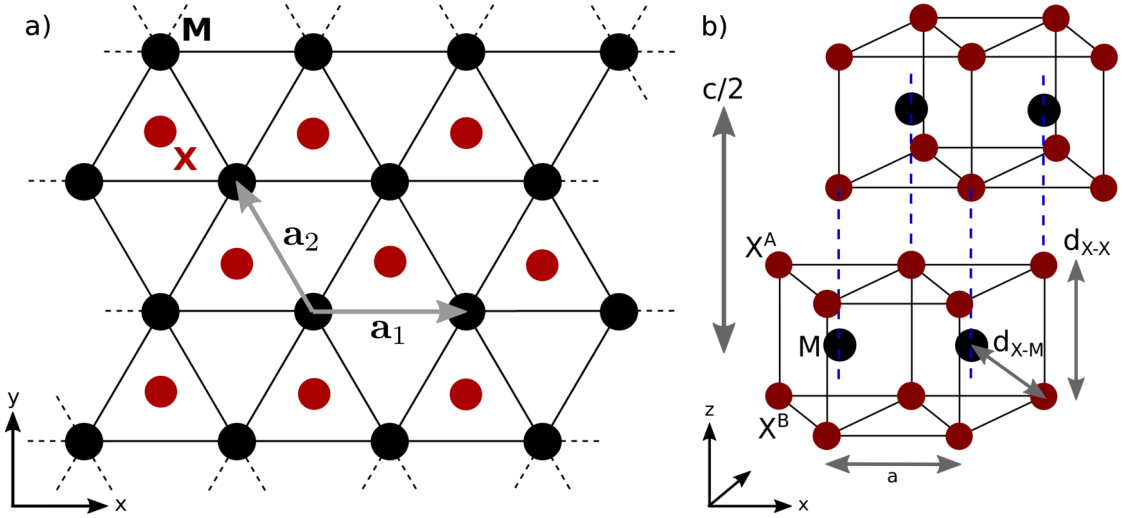
Átmenetifém-dikalkogenidek (TMDCk)

Tulajdonságok:

- Kétdimenziós MX_2 képletű, direkt vagy indirekt tiltott sávval rendelkező félvezetők.
- A tiltott sáv mérete a látható spektrumában van (1-2 eV) és függ a rétegek számától.
- A 2H kétrétegű MoS_2-t tanulmányoztuk

Tight-binding Hamilton-operátor:

- $H(k)$ Fourier térbeli Hamilton-operátor - bulk
  Ab-initio Tight-Binding Hamiltonian for Transition Metal Dichalcogenides, Phys. Rev. B 92, 205108 (2015)
- valós térbeli Hamilton-op. - véges méretű minta
  EQuUs programcsomag



Berry görbület kiszámítása

Berry görbület $\Omega(k)$ a következő alakot ölti:

$$\begin{aligned} A_\mu(k) &= \langle n(k)|\partial_\mu|n(k)\rangle, \qquad \mu \in \{k_x, k_y\} \\ \Omega(k) &= \partial_{k_x} A_{k_y}(k) - \partial_{k_y} A_{k_x}(k) \end{aligned} \tag{1}$$

- $n(k)$ Fourier térbeli Hamilton-op. sajátállapota

Numerikus szempontból könnyebben kezelhető formulát [3] használtunk:

$$\begin{aligned} U_\mu(k) =& \langle n(k)|n(k+\hat{\mu})\rangle / \mathcal{N}_\mu(k) \\ \tilde{\Omega}(k) =& \ln U_{k_x}(k) U_{k_y}(k+\hat{k_x}) U_{k_x}(k+\hat{k_y})^{-1} U_{k_y}(k)^{-1} \end{aligned} \tag{2}$$

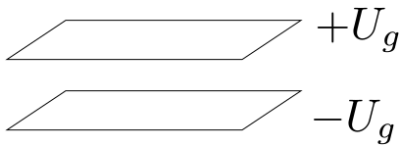
- diszkretizált Brillouin zóna
- $\mathcal{N}_\mu$ normálási faktor
- $\hat{\mu} \in \{\hat{k_x}, \hat{k_y}\}$ egy egységnyi elmozdulás

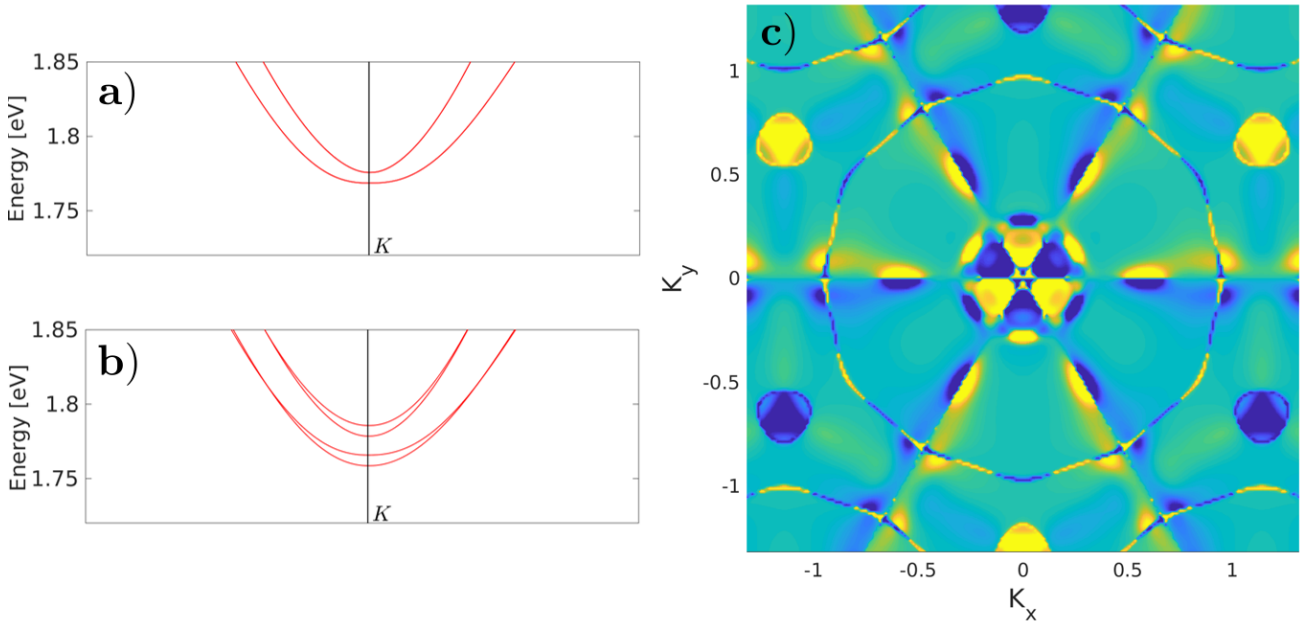
[3] Chern Numbers in Discretized Brillouin Zone: Efficient Method of Computing (Spin) Hall Conductances , J. Phys. Soc. Jpn. 74 (2005)

Berry görbület TMDCkben

Inverzió szimmetria $\rightarrow$ a sávok spin-degeneráltak

Külső U_g elektromos potenciált kapcsolunk a rendszerre





a) két legalső vezetési sáv mikor $U_g = 0$
b) inverzió szimmetria megszűnik ha $U_g \neq 0$ [4]
c) léteznek a Brilluoin zóna olyan részei ahol nagy a Berry görbület

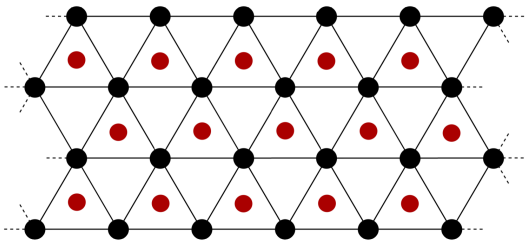
(b és c ábrán $U_g = 10\ meV$)

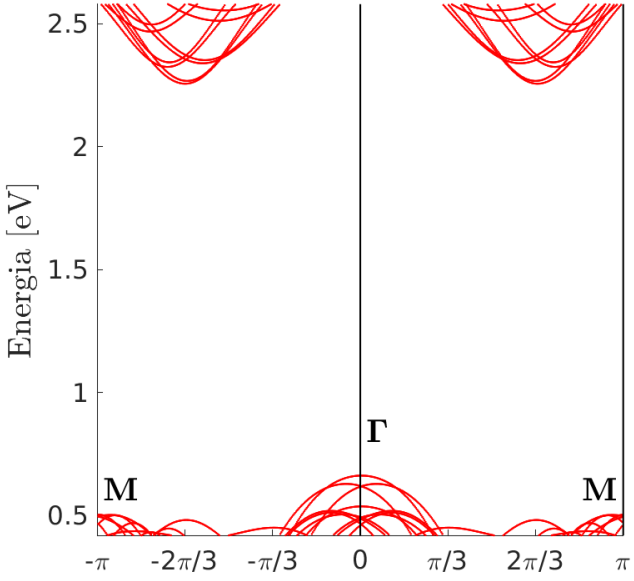
[4] *Tunable Berry curvature, valley and spin Hall effect in Bilayer* MoS_2, Phys. Rev. B 98, 035408 (2018)

Élállapotok

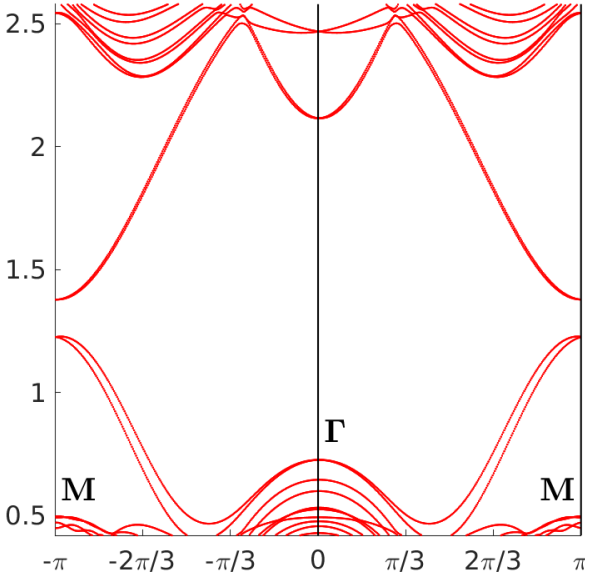
Megvizsgáltunk különböző vastagságú mintákat.

- Azt találtuk hogy a tömbi spektrumtól eltérő állapotok a minta széleire lokalizálódnak.
- a spektrumban több vonal → BZ hajtogatása





Tömbi

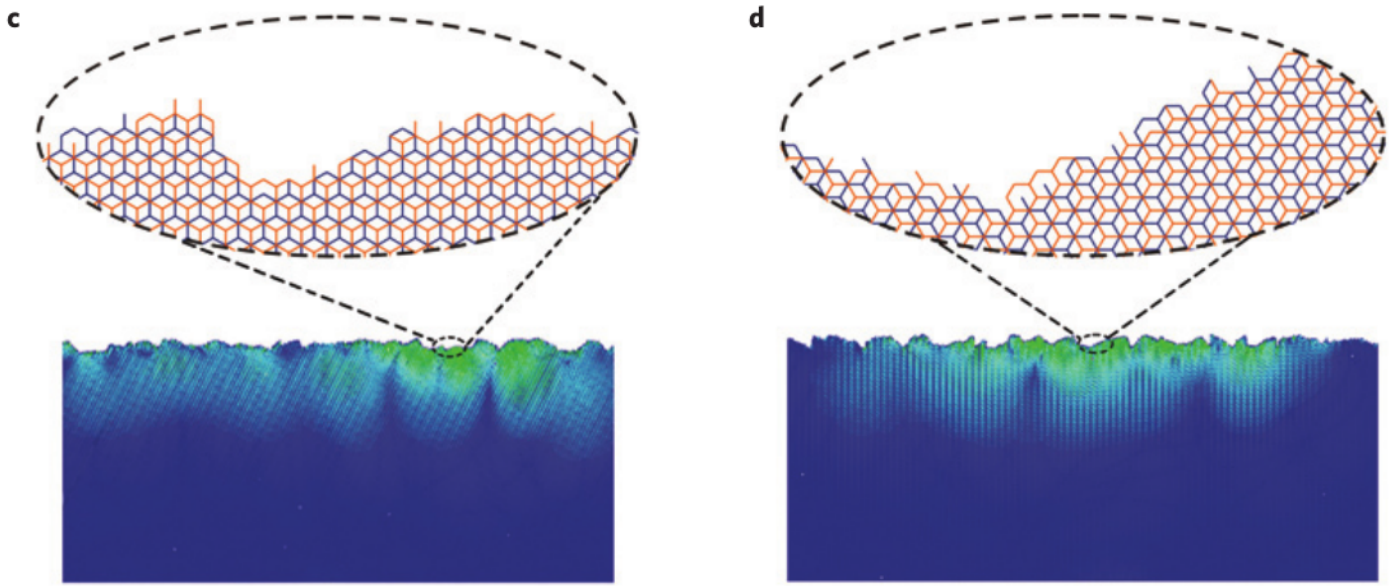


Szalag

Jövőbeni kilátások

Kétrétegű grafén: a rendezetlen él mellett is az élállapotoknak nagy hozzájárulásuk van a vezetőképességhez. [5]

- transzport rendezetlen élű TMDCkben



[5] *Topological origin of subgap conductance in insulating bilayer graphene*, Nature Physics volume 7, pages 38–42 (2011)

Köszönetnyilvánítás

A kutatás a Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alap támogatta a Nemzeti Kiválósági Program keretében, a "Kvantumbitek előállítása, megosztása és kvantuminformációs hálózatok fejlesztése" című, 2017-1.2.1-NKP-2017-00001. számú projekt részeként, illetve az OTKA PD123927 és FK123894 pályázatok támogatásával valósult meg.

Köszönöm a figyelmet

Jian Li, Alberto F. Morpurgo, Markus Büttiker, and Ivar Martin, *Marginality of bulk-edge correspondence for single-valley Hamiltonians*, Phys. Rev. B 82, 245404 (2010)

Shiang Fang, Rodrick Kuate Defo, Sharmila N. Shirodkar, Simon Lieu, Georgios A. Tritsaris, and Efthimios Kaxiras, *Ab-initio Tight-Binding Hamiltonian for Transition Metal Dichalcogenides*, Phys. Rev. B 92, 205108 (2015)

Takahiro Fukui, Yasuhiro Hatsugai and Hiroshi Suzuki, *Chern Numbers in Discretized Brillouin Zone: Efficient Method of Computing (Spin) Hall Conductances* , J. Phys. Soc. Jpn. 74 (2005)

Andor Kormányos, Viktor Zólyomi, Vladimir I. Fal'ko and Guido Burkard, *Tunable Berry curvature, valley and spin Hall effect in Bilayer* MoS_2, Phys. Rev. B 98, 035408

Topological origin of subgap conductance in insulating bilayer graphene Jian Li, Ivar Martin, Markus Büttiker & Alberto F. Morpurgo, Nature Physics volume 7, pages 38–42 (2011)