



Technische
Universität
Braunschweig



$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\frac{\hbar c}{i} \sum_k \alpha_k \partial_k + \beta mc^2 \right) \psi$$

Dirac 1928

QM 2: Dirac Gleichung: Einführung und Anwendung im Bleistift

Prof. Dr. Patrik Recher, 10. Dezember 2013

Inhalt

- Dirac Gleichung in der relativistischen Quantenmechanik
- Dirac im Festkörper: Elektronen in Graphen und topologischen Isolatoren



Dirac Gleichung: Relativistische Beschreibung des Elektrons

- Dirac 1928: 4-komponentige Wellengleichung:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\frac{\hbar c}{i} \sum_k \alpha_k \partial_k + \beta mc^2 \right) \psi$$

$$-i\hbar \partial_k = p_k$$

Ist invariant unter Lorentz-Transformationen

$$\alpha_k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} \quad \beta = \begin{pmatrix} \hat{1} & 0 \\ 0 & -\hat{1} \end{pmatrix}$$

σ_k Pauli-Matrix $k = 1, 2, 3$

Analyse der Gleichung \rightarrow Interpretation des Spinors ψ

Ruhendes Teilchen: $p_k = 0$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \beta mc^2 \psi$$

4 Lösungen:

$$\left. \begin{aligned} \psi_1^+ &= e^{-i\frac{mc^2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \psi_2^+ &= e^{-i\frac{mc^2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} E = mc^2 \\ \text{Teilchen} \end{array}$$

$$\left. \begin{aligned} \psi_1^- &= e^{+i\frac{mc^2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \psi_2^- &= e^{+i\frac{mc^2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} E = -mc^2 \\ \text{Antiteilchen} \end{array}$$

Spin-Operatoren

Lösungen: ψ_α^p , $\alpha = 1, 2$, $p = \pm$ sind auch Lösungen zum **Spin-Operator**:

$$\Sigma = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix}$$

mit **Eigenwerten** $\pm\hbar/2$ mit $\Sigma\psi_\alpha^p = \pm(\hbar/2)\psi_\alpha^p$ $\alpha = 1, 2$

Die Eigenwerte beschreiben den **Elektron-Spin** (Eigendrehimpuls) der in eine Richtung (hier z-Richtung) nur zwei Werte $\pm\hbar/2$ annehmen kann.

Pauli-Glg. als nicht-relativistischer Limes der Dirac-Glg.

Für kleine Energien sollte die **nicht-relativistische** Schrödingerglg. aus QM I gelten.

Um die Bedeutung des Spins hervorzuheben, wollen wir noch die Kopplung an das elektro-magnetische Feld vollziehen (Dirac-Glg.):

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(c\boldsymbol{\alpha} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) + \beta mc^2 + e\Phi \right) \psi$$

$e = -e_0$ (Elektronladung)

Vektorpotential

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

Magnetfeld

skalares Potential

$$-\nabla \Phi = \mathbf{E}$$

elektrisches Feld



Für kleine Energien ($v \ll c$) ist Ruhemasse mc^2 grösste Energie

Ansatz:

$$\psi = \begin{pmatrix} \tilde{\varphi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix} = e^{-i\frac{mc^2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \quad E > 0$$

In führender Ordnung in $1/mc^2$ ergibt sich Pauli-Glg. für „grosse Komponente“ φ

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \underbrace{\frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}}_{\text{Zeemanenergie mit Lande g-Faktor } g=2} + e\Phi \right] \varphi$$

$$\varphi = \begin{pmatrix} \varphi_{\uparrow} \\ \varphi_{\downarrow} \end{pmatrix} \quad \text{Paulispinor}$$

$\frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}$ ist der Spin-Operator

Dirac Gleichung in 2D

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\frac{\hbar c}{i} \sum_k \alpha_k \partial_k + \beta mc^2 \right) \psi \quad \psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$
$$-i\hbar \partial_k = p_k \quad k = 1, 2$$

Nur zwei Komponenten koppeln jeweils → zeitunabhängige **entkoppelte** Dirac-Gln.

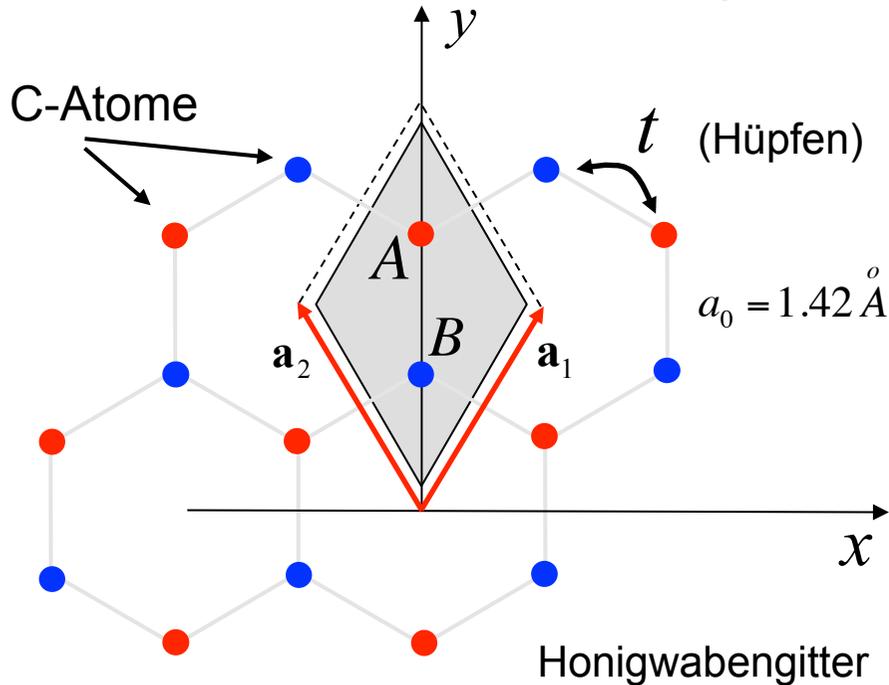
$$(cp_1\sigma_1 + cp_2\sigma_2 + mc^2\sigma_3) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$

$$(-cp_1\sigma_1 + cp_2\sigma_2 + mc^2\sigma_3) \begin{pmatrix} \psi_2 \\ -\psi_3 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_2 \\ -\psi_3 \end{pmatrix}$$

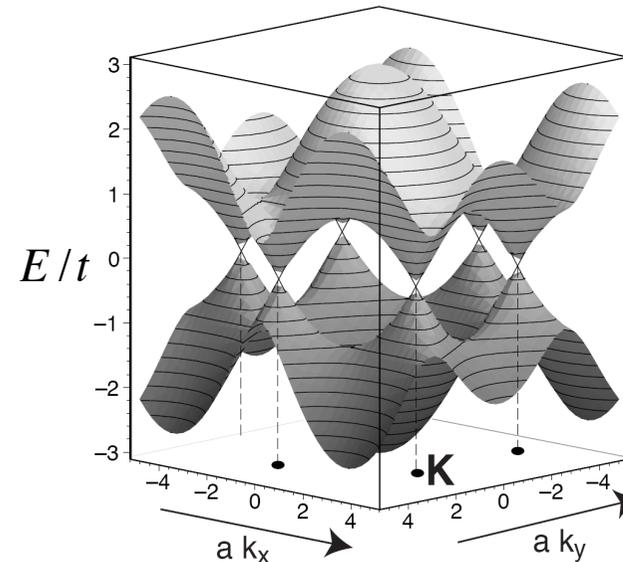


Graphen: Elektronen auf Maschendrahtzaun

A. Geim, K. Novoselov, Nobelpreis 2010



- Kohlenstoff hat **4 Valenzelektronen**, 3 davon in sp^2 Bindungen und 1 besetzt p_z -Orbital
- Einheitszelle (grau) hat **zwei-atomare Basis**
 \Rightarrow A and B Untergitter



C. Schönberger, Uni Basel

- Energie Spektrum in tight-binding Approximation Wallace (1947)

$$E(\mathbf{k}) = \pm v\hbar|\alpha(\mathbf{k})|$$

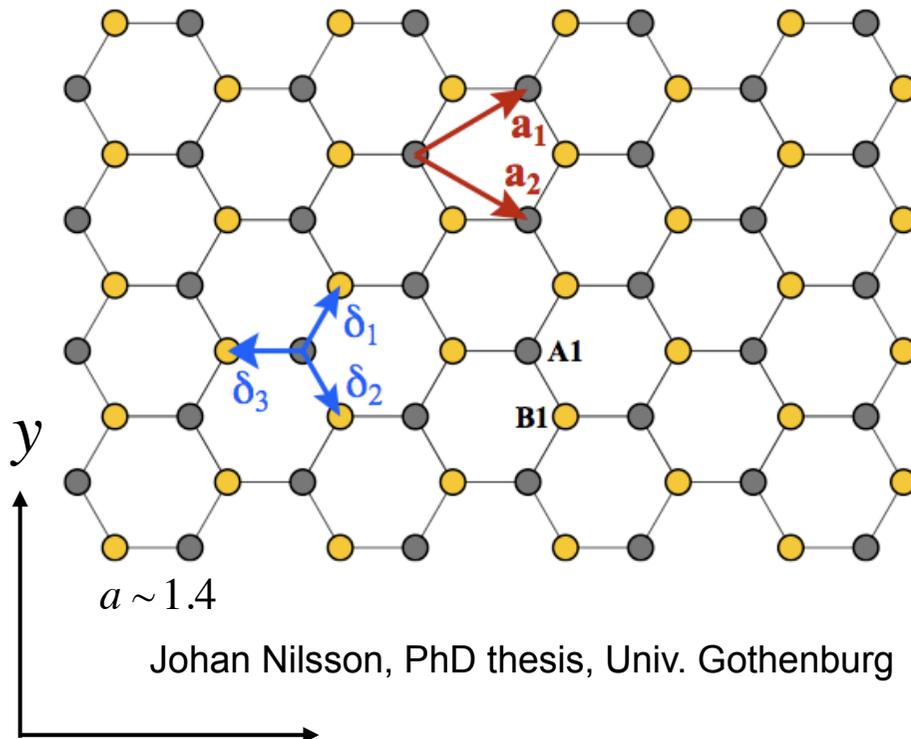
$$v = (\sqrt{3}/2)ta/\hbar \approx 10^6 \text{ m/s} \sim c/300$$

$$a \approx 2.6 \text{ \AA} \quad t \approx 2.9 \text{ eV}$$

$$\alpha(\mathbf{k}) = 1 + \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1) + \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2)$$

Tight-binding Modell von Graphen

Honigwabengitter: zwei Atome pro Einheitszelle (A,B)



Gittervektoren

$$a_1 = a(3, \sqrt{3}) / 2$$

$$a_2 = a(3, -\sqrt{3}) / 2$$

Nächste Nachbarn

$$\delta_1 = a(1, \sqrt{3}) / 2$$

$$\delta_2 = a(1, -\sqrt{3}) / 2$$

$$\delta_3 = a(-1, 0)$$

χ Hüpf-Hamiltonoperator: $H = -t \sum_{R \in A\text{-Atome}} \sum_{j=1,2,3} c_{AR}^+ c_{BR+\delta_j} + h.c.$
(nur nächste Nachbarn)

Hamilton-Operator im k-Raum

Wegen Translationsinvarianz des A,B Untergitters Fouriertransformation in k-Raum:
(entspricht Blochwellenfunktionen)

$$c_{\alpha R} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikR} c_{\alpha k}, \alpha = A, B \rightarrow H \text{ wird diagonal in } k$$

$$H = \sum_k \psi_k^+ \begin{pmatrix} 0 & \xi(k) \\ \xi^*(k) & 0 \end{pmatrix} \psi_k \quad \text{mit} \quad \psi_k = \begin{pmatrix} c_{Ak} \\ c_{Bk} \end{pmatrix}$$

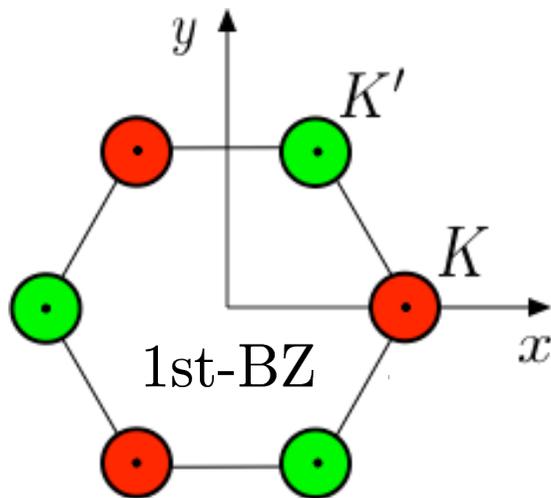
$$\xi(k) = -t \sum_{j=1,2,3} e^{ik\delta_j}$$

- Energieeigenwerte $E(k)$ durch Lösen des charakteristischen Polynoms
- Halbfüllung → $E=0$ =Fermienergie → 2 unabhängige „valleys“ von Zuständen um K, K'
- Entwickle H um K, K' linear in $k-K$ und $k-K'$ → 2 entkoppelte Dirac-Gln. mit $m=0$

Niederenergie Dirac Hamilton Operator

Nahe an den K-Punkten : $\mathbf{k} = \mathbf{K} + \delta\mathbf{k}$

$$E(\mathbf{k}) = E(\mathbf{K}) + \varepsilon(\delta\mathbf{k}) = \varepsilon(\delta\mathbf{k})$$



Dirac-Weyl Hamilton Op. für masselose Fermionen

$$H \sim -i\hbar v \begin{pmatrix} \partial_x \sigma_x + \partial_y \sigma_y & 0 \\ 0 & \partial_x \sigma_x + \partial_y \sigma_y \end{pmatrix}$$

(Note: In the original image, the diagonal terms are circled in red and labeled K and K' respectively.)

$\varepsilon = s\hbar v |\delta\mathbf{k}|$, $s = \pm$ Spektrum von masselosen ultrarelativistischen Teilchen

H wirkt auf **4-komponentigen Spinor** $\Psi = (\psi_{A+}, \psi_{B+}, -\psi_{B-}, \psi_{A-})^T$
 Indizes A,B bezeichnen Amplituden auf den zwei Untergittern => **Pseudospin** σ
 zwei inäquivalente valleys K, K' erzeugen **valley-Isospin** τ Vgl. Dirac Glg. In 2D

Topologische Isolatoren

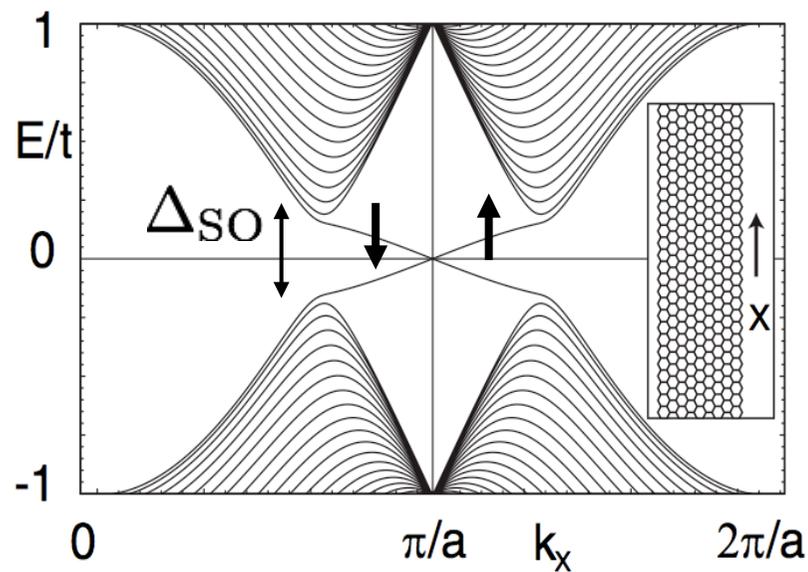
- In 2005, C. Kane and E. Mele sagen neuen Materiezustand in Graphen voraus.



Topologische Isolatoren

- In 2005, C. Kane and E. Mele sagen neuen Materiezustand in Graphen voraus.

den **Quanten Spin Hall Effekt (QSHE)**

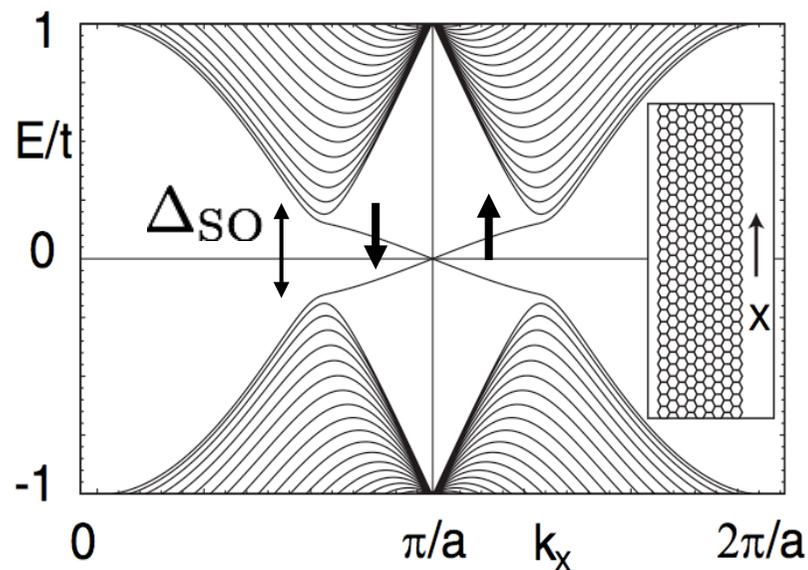


C. Kane, E. Mele, PRL (2005)

Topologische Isolatoren

- In 2005, C. Kane and E. Mele sagen neuen Materiezustand in Graphen voraus.

den **Quanten Spin Hall Effekt (QSHE)**



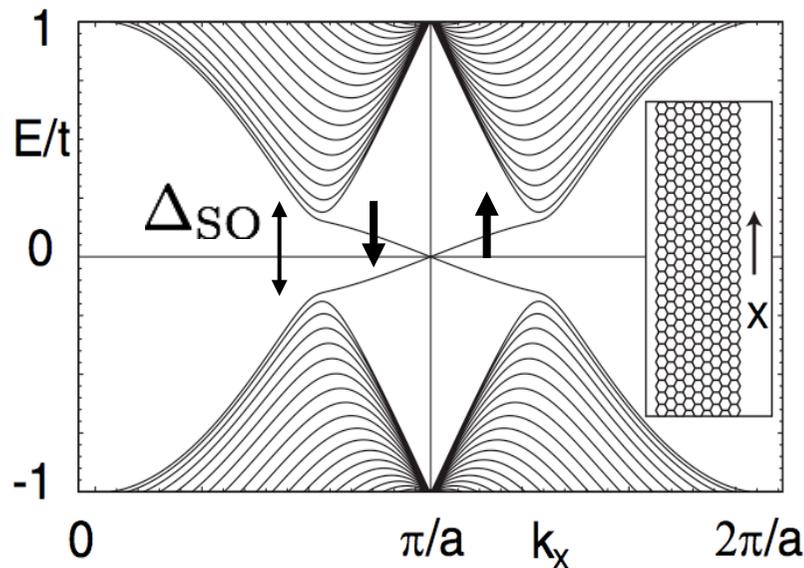
Isolator im Volumen (mit Bandlücke Δ_{SO}),
Randzustände in der Bandlücke

C. Kane, E. Mele, PRL (2005)

Topologische Isolatoren

- In 2005, C. Kane and E. Mele sagen neuen Materiezustand in Graphen voraus.

den Quanten Spin Hall Effekt (QSHE)



C. Kane, E. Mele, PRL (2005)

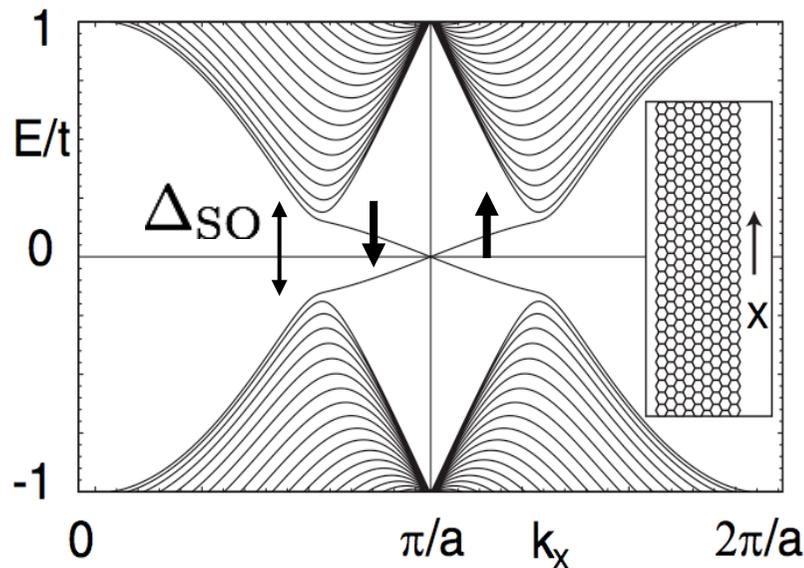
Isolator im Volumen (mit Bandlücke Δ_{SO}),
Randzustände in der Bandlücke

Lücke erzeugt durch spin-abhängige
Wechselwirkung mit Ionengitter (Spin-Bahn WW)

Topologische Isolatoren

- In 2005, C. Kane and E. Mele sagen neuen Materiezustand in Graphen voraus.

den **Quanten Spin Hall Effekt (QSHE)**



C. Kane, E. Mele, PRL (2005)

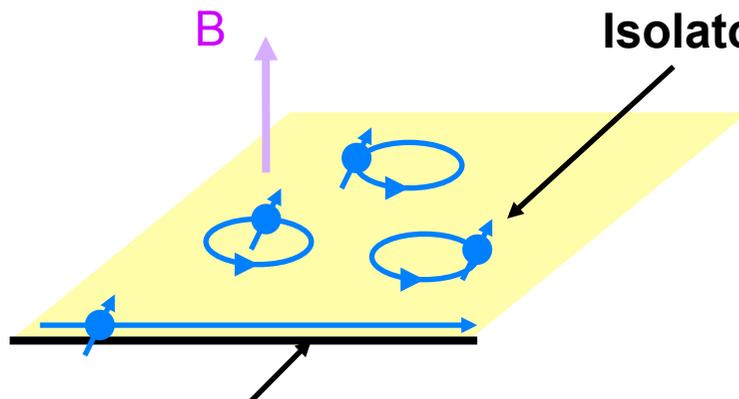
Isolator im Volumen (mit Bandlücke Δ_{SO}),
Randzustände in der Bandlücke

Lücke erzeugt durch spin-abhängige
Wechselwirkung mit Ionengitter (Spin-Bahn WW)

Randzustände sind spin-polarisiert

Quanten Hall Zustände mit Zeitumkehr Invarianz (TRI)

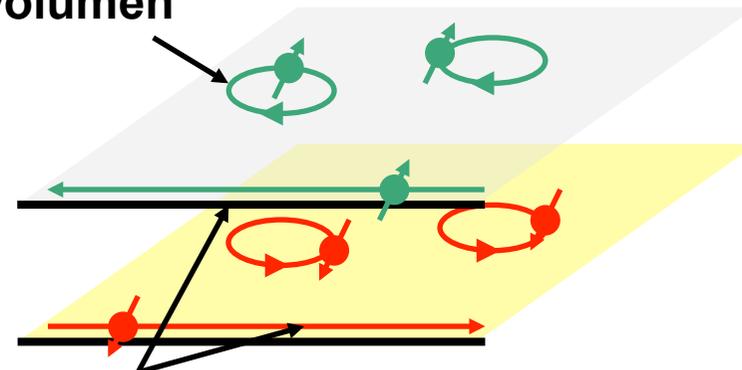
Quanten Hall Effekt



chirale Randzustände

bricht TRI, Magnetfeld

Quanten Spin Hall Effekt



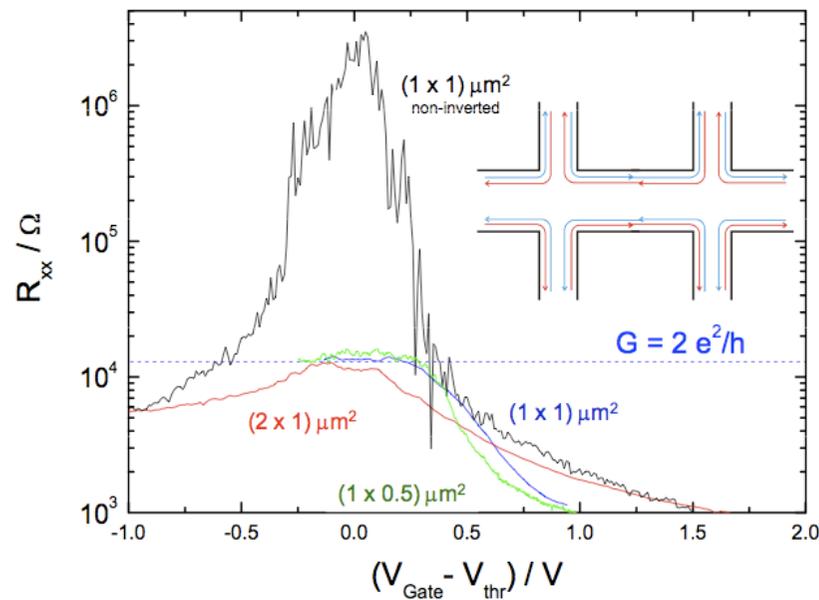
helikale Randzustände

hat TRI, Spin-Bahn WW

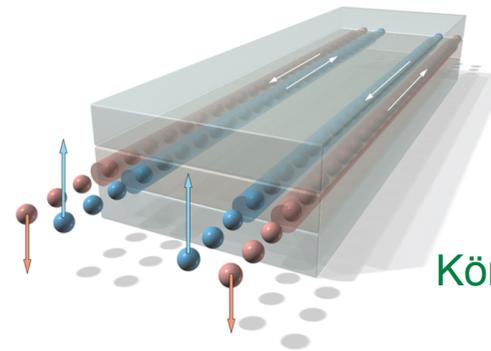


Experimentelle Realisationen

- in **Graphen** vorausgesagt, ABER Spin-Bahn WW zu schwach
- in **HgTe/CdTe Quantentrögen** (Bernevig et al., Science 2006 (Theorie))



Experimentelle Verifizierung des QSHE:
Gruppe L. Molenkamp Würzburg (2007)

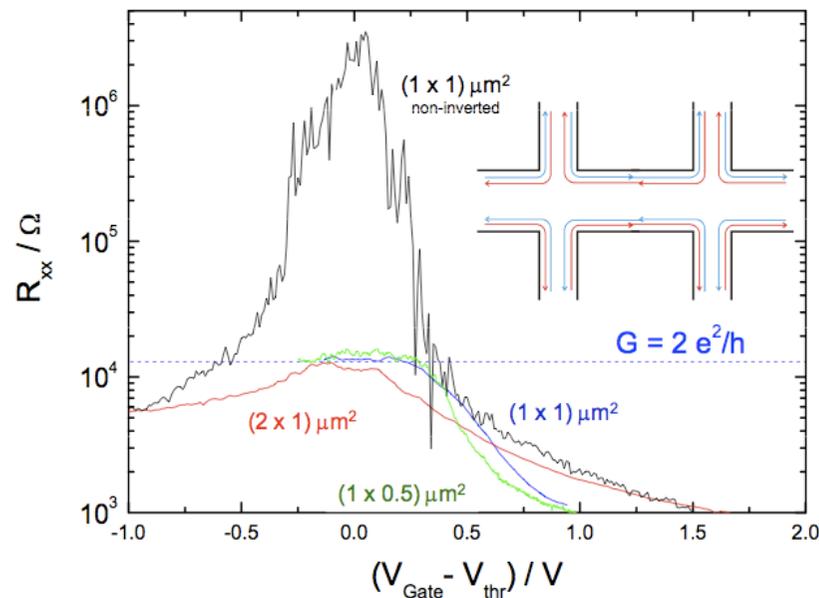


König et al., Science (2007)

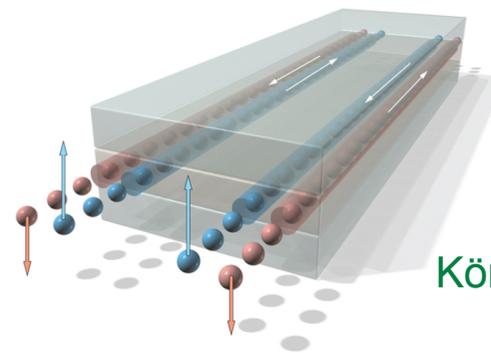
König et al., Science 318, 766 (2007)

Experimentelle Realisationen

- in **Graphen** vorausgesagt, ABER Spin-Bahn WW zu schwach
- in **HgTe/CdTe Quantentrögen** (Bernevig et al., Science 2006 (Theorie))



Experimentelle Verifizierung des QSHE:
Gruppe L. Molenkamp Würzburg (2007)

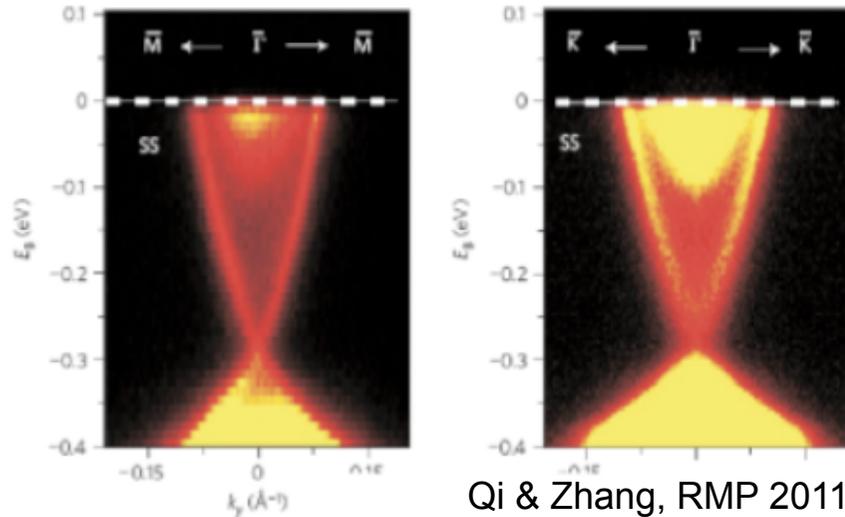


König et al., Science (2007)

König et al., Science 318, 766 (2007)

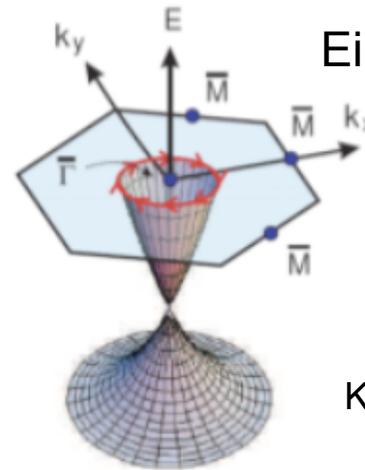
L. Molenkamp: Leibniz-Preis (DFG) Dez. 2013

3D Topologische Isolatoren = 2D Oberflächenzustände

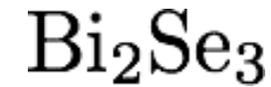


Qi & Zhang, RMP 2011

ARPES Daten Hasan Gruppe Princeton



Einzelner DIRAC-cone



Kane & Hasan, RMP (2010)

- Einzelner (nicht-entarteter) “Dirac cone” von “helical” Zuständen
⇒ 2D geschützte Oberflächen-Zustände (keine Rückstreuung)
und Spin-Transport (Elektronik mit geringer Dissipation!)