

Wechselwirkungsinduzierte topologische Quantenphasen in zweidimensionalen Dirac-Fermion-Systemen

Masterarbeit

zur Erlangung des akademischen Grades

Master of Science

vorgelegt von

Sascha Heinrich Heußen

geboren am 29. Juli 1993 in Viersen



Lehrstuhl für Theoretische Physik I

Fakultät Physik

2017

1. Gutachter: Prof. Dr. Götz S. Uhrig
2. Gutachter: Priv.-Doz. Dr. Jörg Bünemann

Eingereicht am 29. September 2017

Kurzzusammenfassung

Topologische Phasen des um eine Hubbard-Wechselwirkung erweiterten spinvollen Haldane-Modells werden auf dem Bienenwabengitter in zwei Raumdimensionen untersucht. Im Grenzfall verschwindender Temperatur wird dazu eine Formulierung ausgehend von den Bulk-Eigenschaften des Systems verwendet. Mit der dynamischen Störstellen-Approximation wird eine thermodynamisch konsistente nicht-perturbative Methode zur Behandlung der Wechselwirkung benutzt, die auf der Selbstenergiefunktional-Theorie basiert. Verschiedene Quantenphasen des Modells werden als stationäre Punkte des großkanonischen Potentials identifiziert und Chern-Zahlen in diesen Phasen bestimmt. Zwischen der Chern- bzw. Band-Isolator-Phase des Haldane-Modells bei schwacher Wechselwirkung und dem Mott-Isolator, der hier durch Betrachtung lokaler Zustandsdichten für verschiedene Haldane-Parameter für $U/t > U_c/t \approx 10.5 - 12$ gefunden wird, existiert ein Bereich mittlerer Wechselwirkung, in dem das Spektrum eine endliche Bandlücke besitzt und topologisch trivial bleibt. Aufgrund der Spinsymmetrie des verwendeten Modells können topologisch nicht-triviale Phasen, die diese spontan brechen, nicht detektiert werden.

Abstract

Based on bulk considerations we investigate topological properties of the extended spinful Haldane model on the honeycomb lattice in two spatial dimensions which carries an additional on-site Hubbard interaction in the zero temperature limit. The dynamical impurity approximation derived from selfenergy functional theory empowers a non-perturbative treatment of interactions in a thermodynamically consistent way imposing local constraints on the selfenergy. Stationary points of the grand canonical potential derived within the framework of selfenergy functional theory identify various quantum phases that may carry different associated Chern numbers. Far from both the weakly interacting Chern or band insulator and strongly interacting Mott phase, which we find for various Haldane parameters at $U/t > U_c/t \approx 10.5 - 12$ via local density of states calculations, the energy spectrum shows a band gap in an intermediate interaction regime which is topologically trivial. Given the spin symmetry of the model at hand phases that spontaneously break this symmetry cannot be detected although they might be topologically non-trivial.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Topologische Phasen	5
2.1	Topologische Bandtheorie	6
2.2	Hubbard-Modell	8
2.2.1	Wechselwirkung im Hubbard-Modell	9
2.2.2	Anderson-Störstellen-Modell	11
2.2.3	Topologische Isolatoren mit Wechselwirkung	13
2.3	Haldane-Modell	14
2.4	Randzustände und Zeitumkehrinvarianz im Kane-Mele-Modell	19
3	Methoden	21
3.1	Das großkanonische Ensemble	21
3.2	Selbstenergiefunktional-Theorie	22
3.2.1	Quanten-Cluster-Methoden	26
3.2.2	Lokale Näherungen	28
3.2.3	Berechnung des großkanonischen Potentials	31
3.2.4	DIA mit einem Badplatz	34
3.3	Exakte Diagonalisierung	35
3.4	Numerische Bestimmung von Zustandsdichten	36
3.5	Chern-Zahlen nach Fukui	36
4	Resultate	39
4.1	Potentialminima und Selbstenergie	39
4.2	Isolierende Phasen und Untergitterstruktur	46
4.3	Topologischer Hamilton-Operator	54
5	Zusammenfassung & Ausblick	57
A	Appendix	59
A.1	Parametrisierung des Haldane-Modells	59
A.2	Berechnung von lokalen Green-Funktionen und Zustandsdichten	59
A.3	Potentiallandschaften mit $\phi = \pi/2$	62
	Literaturverzeichnis	66

1 Einleitung

Jedes Kind weiß um die Existenz der drei alltäglich beobachtbaren Materiephasen: fest, flüssig und gasförmig. Ein interessiertes Kind mag nach dem Spielen mit Magnet-Eisenbahnen die Frage nach der mysteriösen Natur dieser an- und abstoßenden Kraft gestellt haben und das Verfolgen dieser Frage bis zum Studium der Physik führt zur Erkenntnis über den Ferromagnetismus im Rahmen der Quantenmechanik. Erstaunlicherweise bietet zur Erklärung des schiereren Reichtums an Materiephasen, für die die ferromagnetische nur ein Beispiel unter unzähligen anderen ist, die Ginzburg-Landau-Theorie der spontanen Symmetriebrechung ein unerwartet simples mathematisches Fundament. In den vergangenen Jahrzehnten wurde die Unzureichlichkeit dieser Theorie klar und die Tür zu einer völlig neuen Klasse exotischer Materie wurde aufgestoßen.

Die experimentelle Entdeckung von Graphen im Jahr 2004 [1] eröffnete den Weg zum anwendungsbezogenen Studium zweidimensionaler (2D) Materialien mit fundamentaler theoretischer und praktischer technologischer Relevanz für Industrie und Forschung. Neben Graphen wurden in den Folgejahren immer weitere zweidimensionale Materialien mit nicht weniger außergewöhnlichen elastischen und elektronischen Eigenschaften auf der Basis verschiedenster Elemente entdeckt [2]. Beispiele hierfür sind Silicen, Germanen oder Borophen auf der Basis von Silizium, Germanium und Bor. Theoretische Betrachtungen schätzen die Anzahl der stabilen zweidimensionalen Kristallstrukturen auf ca. 700 verschiedene potentiell synthetisierbare Materialien [3]. Graphen bildet außerdem die Grundlage zur Bildung von kohlenstoff-basierten Materialien verschiedener Dimensionalität. Als berühmte Vertreter sind Fullerene in null, Nanoröhrchen in einer, Graphen selbst in zwei oder Graphit in drei Raumdimensionen zu nennen. Diese Art von quasi-zweidimensionalen Materialien verletzen nicht das Mermin-Wagner-Theorem, das die langreichweitige Anordnung von Atomen in einer periodischen Gitterstruktur in niedrigen Dimensionen bei endlichen Temperaturen verbietet, indem die Voraussetzungen des Theorems umgangen werden, z. B. durch eine Welligkeit des Materials. Neben seinen vorteilhaften mechanischen Eigenschaften, weist Graphen exotische elektronische Eigenschaften auf. Elektronen können sich im Material pseudo-relativistisch bewegen und Transport von Spin-Freiheitsgraden kann losgelöst von elektrischer Ladung stattfinden, was Graphen für Anwendungen in der Spintronik und zur Informationsverarbeitung qualifiziert [4].

Graphenartige Systeme, die aus schweren Elementen gebildet werden, zeigen starke Spin-Bahn-Kopplungs-Effekte und können sich in Phasen befinden, die durch topologische Invarianten charakterisiert werden. Diese Phasen besitzen keine lokalen Ordnungsparameter und unterscheiden sich nicht durch kontinuierliche Symmetrien voneinander, sondern werden allein durch die Topologie des Systems und diskrete Symmetrien klassifiziert. Es existiert ein „Periodensystem“, das wechselwirkungsfreie topologische Systeme

in zehn Klassen, die aus Kombinationen des Verhaltens des Systems unter Teilchen-Loch-Transformation, Ladungskonjugation und Zeitumkehr gebildet werden, einteilt [5, 6]. Vom mathematischen Gesichtspunkt aus ist die Topologie einer geschlossenen Mannigfaltigkeit allein durch sein Genus bestimmt und alle glatten Mannigfaltigkeiten gleichen Genus' sind kontinuierlich ineinander überführbar. Obwohl sie ein lange etabliertes eigenständiges Teilgebiet der Mathematik darstellt, wurde die fundamentale Bedeutung von Topologie zur Unterscheidung und Charakterisierung verschiedener Materiephasen in der Physik erst in den letzten Jahrzehnten offenkundig. Zu unterscheiden sind fundamentale Vielteilchen-Phänomene, die topologische Ordnung zeigen und topologische Phasen, deren topologische Natur durch ganzzahlige topologische Invarianten bestimmt wird. Während topologische Ordnung eine Charakteristik des Grundzustandes ist, muss bei der Behandlung topologischer Phasen das gesamte Energie-Spektrum betrachtet werden.

In Systemen mit topologischer Ordnung existieren hochverschränkte Grundzustände, die auch bei starken Wechselwirkungseinflüssen stabil bleiben [7]. Diese topologisch geschützte Grundzustandsentartung, die vom Genus der Systemtopologie abhängt und ein echter Vielteilchen-Effekt ist, verursacht einen topologischen Beitrag in der Verschränkungsentropie, die einen direkten experimentellen Zugang zu topologischen Eigenschaften eröffnet. Der fraktionale Quanten-Hall-Effekt [8, 9], in dessen Regime bei extrem niedrigen Temperaturen und starken Magnetfeldern in einem zweidimensionalen Elektronengas Quasiteilchen aus fraktionalem Ladungsfreiheitsgraden und Flussquanten zusammengesetzt werden, ist ein berühmtes Beispiel für topologische Ordnung. Der Effekt äußert sich in der Quantisierung der transversalen Hall-Leitfähigkeit zu rationalen Vielfachen von e^2/h und grenzt sich so vom ganzzahligen Quanten-Hall-Effekt [10] ab. Topologisch geordnete Systeme können in zwei Dimensionen anyonische Quasiteilchen beherbergen, die einer nicht-abelschen Vertauschungsrelation gehorchen. Auf Grund dessen könnte durch die Art der Vertauschung dieser Teilchen Information kodiert werden, die nicht räumlich lokalisiert und durch die Topologie vor Dekohärenz geschützt ist – zwei Schlüsseleigenschaften zur experimentellen Realisierung von Quantencomputern, die viele Forschungsvorhaben in diese Richtung motivieren [11].

Das Konzept der topologischen Phasen ist auf einem Ein-Teilchen-Hamilton-Operator-Formalismus aufgebaut. Zur Bestimmung von topologischen Invarianten ist in der Regel das gesamte Bulk-Spektrum nötig. Die Nicht-Trivialität dieser Invarianten implizieren nach der sogenannten „Bulk-Edge-Correspondence“ lückenlose Anregungen an den Rändern des Systems und sind eine Ausprägung eines fundamentalen Prinzips. Es existiert eine Forschungsrichtung in der Kosmologie, die die Bulk-Edge-Correspondence im Holographischen Prinzip wiederzufinden scheint und Verbindungen dieser beiden scheinbar völlig verschiedenen Bereiche moderner Physik herstellt [12]. Das prominenteste Beispiel einer topologischen Phase ist die des topologischen Isolators [13], der im zeitumkehrinvarianten Fall an jedem Rand zwei uni-direktional entgegengesetzt propagierende Zustände aufweist, deren Wellenfunktionen exponentiell am Systemrand lokalisiert sind. Sie sind stabil gegen starke Unordnung, die in der Praxis durch Verunreinigungen des betrachteten Materials immer gegeben ist, und sind nicht auf Elektronen als propagierende (Quasi-)Teilchen beschränkt. Sogenannte chirale Randzustände können

auch für Photonen, die aufgrund ihrer bosonischen Statistik, verschwindenden Masse und Vektornatur völlig von Elektronen verschieden sind, beobachtet werden, was die fundamentale Bedeutung der Bulk-Edge-Correspondence unterstreicht [14]. Potentiell eignen sie sich wegen dieser Universalität und Robustheit beispielsweise für neue Möglichkeiten zur verlustlosen Signalübertragung. Mit einem endlichen Paar-Potential Δ zur Erzeugung von Cooper-Paaren, das die für Supraleitung entscheidende Teilchen-Loch-Symmetrie respektiert, lassen sich auch supraleitende Phasen mit nicht-trivialer Topologie konstruieren [15].

Während sich viele theoretische und experimentelle Untersuchungen auf zwei Raumdimensionen beschränken, sind auch dreidimensionale topologische Isolatoren experimentell realisiert worden. Zum ersten Mal konnten in $\text{Bi}_{0.9}\text{Si}_{1.1}$ mittels „incident-photonenergy-modulated angle-resolved photoemission spectroscopy“- (IPEM-ARPES)-Methode massive Dirac-Teilchen direkt beobachtet und sogenannte Kramers-Punkte, zeitumkehrinvariante Kreuzungspunkte von Randzuständen in der Dispersion, lokalisiert werden [16].

Andere topologische Quasiteilchen sind lediglich theoretisch vorhergesagt. So können in extern getriebenen Systemen, topologischen Floquet-Isolatoren [17], topologisch triviale Exzitonen an einfallende Photonen koppeln und einen gebundenen topologischen Quasiteilchen-Zustand, das Topolariton bilden [18]. Topolaritonen können potentiell in Halbleiter-Quantentöpfen, die sich zwischen zwei Wellenleitern oder in einer Mikrokaunität befinden, oder einschichtigen Übergangsmetallen aus Dichalkogeniden auftreten. Der Übergang zwischen diesen beiden Phasen mit unterschiedlichen topologischen Eigenschaften – ohne und mit gekoppelten Exziton-Photon-Paaren – wird am absoluten Temperaturnullpunkt als topologischer Quantenphasenübergang bezeichnet.

Die Erweiterung der Konzepte dieser „Topologischen Bandtheorie“ auf wechselwirkende Systeme ist nicht ohne Weiteres möglich und es existiert im Allgemeinen keine mathematisch rigorose Methode zur exakten Lösung von wechselwirkenden Vielteilchen-Systemen. Topologische Invarianten, die nur ganze Zahlen annehmen können, sind nur für wechselwirkungsfreie Systeme definiert. Eine nicht-perturbative Behandlung von Wechselwirkungen scheint attraktiv, da die Konvergenz von Reihenentwicklungen in einem kleinen Parameter nicht garantiert ist. Eine Verallgemeinerung der Konzepte der topologischen Bandtheorie ist also gefragt, um Quantenphasenübergänge zwischen topologischen Phasen durch Wechselwirkung zu induzieren. Solche verallgemeinernde Klassifikationen werden in dieser Arbeit diskutiert und angewandt.

Die vorliegende Arbeit ist wie folgt gegliedert. Im folgenden Kapitel wird die topologische Bandtheorie im Detail vorgestellt. Wir geben einen Überblick über die zentrale Größe der Berry-Krümmung und einige Konsequenzen einer nicht-trivialen System-Geometrie. Danach wird das Hubbard-Modell als Standard-Tight-Binding-Modell zur Beschreibung von Wechselwirkung in Vielteilchen-Gittersystemen diskutiert. Einige grundsätzliche Überlegungen zur Verbindung zwischen topologischen Isolatoren und Wechselwirkungseffekten werden in diesem Zusammenhang angesprochen. Danach gehen wir auf die Rolle von Topologie und diskreten Symmetrien im Detail am Beispiel des Haldane-Modells ein. Das dritte Kapitel stellt die hier verwendeten Methoden vor. Zuerst führen wir die Selbstenergiefunktional-Theorie allgemein und in lokaler Näherung

für das hier verwendete Bienenwabengitter ein, um im Anschluss die dazu notwendigen numerischen Methoden zu erläutern. Daraufhin präsentieren wir die damit erzielten Resultate und Erkenntnisse über die Rolle, die Wechselwirkungseffekte im topologischen Regime des betrachteten Modells spielen. Zum Schluss fassen wir das Vorgehen und die Ergebnisse zusammen und geben einen Ausblick für mögliche weitere Forschung.

2 Topologische Phasen

Obwohl die Ginzburg-Landau-Theorie der Phasenübergänge [19] wohl zweifellos eine der großen Errungenschaften moderner Physik darstellen, stellte sich ihre Unvollständigkeit erst mit der Entdeckung topologischer Phasen, sowie der Entwicklung der topologischen Bandtheorie heraus. So kann sich Materie in lückenbehafteten Phasen befinden, die nicht adiabatisch mit dem atomaren Limes verknüpft sind, sondern durch eine ganzzahlige topologische Invariante charakterisiert sind, die sich nur durch Schließen der Bandlücke ändern kann.

Im Gegensatz dazu ändert sich ein lokaler Ordnungsparameter in der Ginzburg-Landau-Theorie innerhalb der geordneten Phase, z. B. Supraleitung, (Anti-)Ferromagnetismus oder Bose-Einstein-Kondensate, kontinuierlich und fällt am Phasenübergang zur ungeordneten Phase mit einem kritischen Exponenten auf Null ab. Die geordnete Phase zeigt das Phänomen der spontanen Symmetriebrechung, der Grundzustand hat also eine niedrigere Symmetrie als der Hamilton-Operator des Systems. Das zeigt sich zum Beispiel im Falle des Ferromagnetismus durch die Wahl einer Vorzugsrichtung der Magnetisierung, obwohl der zugrunde liegende Hamilton-Operator eine $SU(2)$ -Symmetrie besitzt. Neben kontinuierlichen Phasenübergängen existieren Phasenübergänge erster Ordnung, die durch eine Unstetigkeit der freien Energie gekennzeichnet sind, die beispielsweise beim fest-flüssig Übergang von Wasser vorliegt. Der Ordnungsparameter charakterisiert hier lediglich die lokale Ordnung des Systems, während topologische Ordnung globaler Natur ist. Als anschauliches Beispiel sei die vierfache Entartung des Grundzustandes im „Toric Code“-Modell genannt, die sich aus den Kombinationen nicht-kontrahierbarer Schleifen ergibt [20].

In diesem Abschnitt wird das Konzept der topologischen Invariante, speziell der Chern-Zahl, erläutert und das Haldane-Modell als instruktives Beispiel der topologischen Bandtheorie diskutiert. Sie erweitert die im 20. Jahrhundert etablierte elektronische Bandtheorie der Festkörperphysik, die die kristallimpulsabhängigen Energie-Eigenwerte des Systems zur bestimmenden Größe erklärt, und bezieht die Topologie des Systems mit ein. In diesem Zusammenhang soll auch auf den Einfluss von Coulomb-Wechselwirkung zwischen Elektronen eingegangen werden. Eines der prominentesten und faszinierendsten Phänomene stellt der Metall-Mott-Isolator-Übergang [21] dar. Diese wechselwirkungsinduzierte Phase zeichnet sich durch antiferromagnetische Ordnung aus, die Elektronenmobilität aufgrund von Coulomb-Abstoßung verhindert, obwohl die Bandstruktur metallisches Verhalten vorhersagt.

Danach wird kurz auf das Anderson-Störstellenmodell als Beispiel für ein exakt lösbares Problem mit Wechselwirkung eingegangen. Außerdem diskutieren wir Methoden, mit denen topologische Isolatoren in Anwesenheit von Wechselwirkung beschrieben werden können. Zum Schluss wird das Konzept von lückenlosen Randzuständen im Haldane-

und im Kane-Mele-Modell erläutert und die Rolle von diskreten Symmetrien, speziell Zeitumkehrinvarianz, diskutiert.

2.1 Topologische Bandtheorie

Allgemein bezeichnet das Attribut „topologisch“ das Studium von mathematischen Eigenschaften, die bei stetigen Verformungen erhalten bleiben. Topologie stellt ein eigenständiges Teilgebiet der Mathematik dar [22]. Sie wird extrem erfolgreich in physikalischen Kontexten angewandt und sagt Materialklassen mit neuen exotischen elektronischen und magnetischen Eigenschaften voraus. Als topologische Größen werden in der Physik solche bezeichnet, die sich bei kontinuierlichen Deformationen des Hamilton-Operators nicht ändern [15].

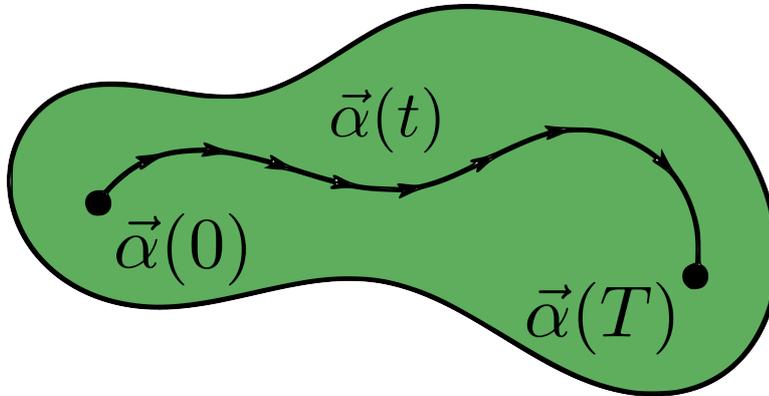


Abbildung 2.1: Änderung des Parametersatzes $\vec{\alpha}$ im reellen Parameterraum mit $n = 2$ Dimensionen in Abhängigkeit der Zeit t vom Startpunkt $t = 0$ zum Endpunkt $t = T$.

Nur bei nicht-adiabatischer Verformung der Bandstruktur, z. B. dem Schließen einer Bandlücke, können sich topologische Größen ändern. Ein Zugang zur topologischen Bandtheorie eröffnet sich durch Betrachtung eines nicht entarteten Eigenwertproblems $H(\vec{\alpha}) |\Psi(\vec{\alpha})\rangle = E(\vec{\alpha}) |\Psi(\vec{\alpha})\rangle$ zum Hamilton-Operator H mit Eigenwerten $E(\vec{\alpha})$ und Eigenvektoren $|\Psi(\vec{\alpha})\rangle$, die von einem Parametersatz $\vec{\alpha} = \vec{\alpha}(t)$ abhängen, die sich kontinuierlich mit der Zeit $t \in [0, T]$ ändern, wie Abbildung 2.1 illustriert. Mit $|\Psi(t)\rangle \equiv |\Psi(\vec{\alpha}(t))\rangle$ setzt sich für langsame Variation $\partial_t H \approx 0$ mit der Zeit

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\Phi(t)} |\Psi(t=0)\rangle \quad (2.1)$$

$$\text{mit } \Phi(t) = \underbrace{\int_0^t E(\vec{\alpha}(t')) dt'}_{\text{dynamische Phase}} - \underbrace{\gamma(t)}_{\text{Berry-Phase}} \quad (2.2)$$

der Anteil der $U(1)$ -Phase aus der bekannten dynamischen Phase der Eigenwerte und einem geometrischen Anteil, der sogenannten Berry-Phase [23], zusammen. Die Berry-Phase eines Bandes n kann durch das Berry-Vektorpotential \vec{A}_n ausgedrückt werden.

$$\gamma_n = \int_{\Gamma} d\vec{\alpha} \vec{A}_n(\vec{\alpha}) = \int_0^t dt' i \langle \psi_n(\vec{\alpha}(t')) | \frac{d}{dt'} | \psi_n(\vec{\alpha}(t')) \rangle \quad (2.3)$$

Mit einem geschlossenen Pfad Γ ist γ_n bis auf ein Vielfaches von 2π (vgl. Gleichung (2.1)) invariant unter der $U(1)$ -Eichtransformation

$$\vec{A}_n \longrightarrow \vec{A}_n + \vec{\nabla} \lambda \quad (2.4)$$

und die Berry-Krümmung, durch formale Analogie zum Elektromagnetismus auch Berry-Feldstärke genannt, wird als

$$\vec{F}_n = \vec{\nabla} \times \vec{A}_n \quad (2.5)$$

definiert. Der Index n bezieht sich hier auf das n -te nicht-entartete Energieband des Hamilton-Operators. Die Berry-Feldstärke ist als physikalische Observable eichinvariant unter der oben genannten $U(1)$ -Eichtransformation [15]. Das Stokes-Theorem verknüpft nun das Potential entlang des durch $\vec{\alpha}$ parametrisierten Weges mit der Feldstärke innerhalb der vom Weg Γ eingeschlossenen Fläche S . Die totale Zeitableitung in Gl. (2.3) kann in einen Gradienten des Parametersatzes $\vec{\alpha}$ überführt werden. Mit Kristallimpuls \vec{k} als reellem Parameter erhalten wir in zwei Raumdimensionen die Chern-Zahl C_n als Integral der Berry-Feldstärke über die Brillouin-Zone [15]

$$\oint_{\Gamma} \vec{A}_n(\vec{k}) d\vec{k} = \int_S \vec{F}_n(\vec{k}) d\vec{S} \quad (2.6a)$$

$$= - \int_S d\vec{S} \operatorname{Im} \sum_{n \neq m} \frac{\langle \psi_n | \vec{\nabla}_{\vec{k}} H(\vec{k}) | \psi_m \rangle \times \langle \psi_m | \vec{\nabla}_{\vec{k}} H(\vec{k}) | \psi_n \rangle}{(E_n - E_m)^2} \quad (2.6b)$$

$$C_n \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{\text{BZ}} F_n(\vec{k}) d^2\vec{k}. \quad (2.6c)$$

Die Darstellung (2.6b) eignet sich zur Berechnung von Chern-Zahlen mit dem Computer, da sie die Ableitung von den Eigenvektoren, deren Phase bei der numerischen Berechnung fluktuieren kann, auf den Hamilton-Operator verschiebt. Außerdem wird deutlich, dass die Berry-Feldstärke bei Bandentartung $m = n$ singulär wird. Sie verhält sich formal wie das elektrische Feld einer Punktladung. Die Formulierung (2.6a) entspricht dann dem Satz von Gauß, nach dem das Volumenintegral um eine Punktladung dem die Oberfläche durchströmenden elektrischen bzw. hier magnetischen Fluss entspricht. Abbildung 2.2 zeigt den von einem Monopol ausgehenden „magnetischen“ Fluss durch die (oft) torusförmige Brillouin-Zone. Die Chern-Zahl misst nach dieser Interpretation die Anzahl der Monopole innerhalb des Torus. Die Chern-Zahl eines Bandes n unterscheidet als ganzzahlige topologische Invariante die verschiedenen isolierenden Phasen des Systems voneinander. Sie kann sich nur durch Schließen einer Bandlücke ändern. Die Summe der Chern-Zahlen über alle Bänder $\sum_n C_n = 0$ verschwindet [15].

Im Folgenden wollen wir uns die in dieser Arbeit verwendeten Modelle in zweiter Quantisierung anschauen und ihre topologischen Eigenschaften diskutieren. Wir beginnen mit dem allen Modellen gemeinsamen Tight-Binding-Hamilton-Operator und erklären das Hubbard-Modell, das eine lokale Wechselwirkung zwischen Elektronen mit verschiedenen Spin-Orientierungen enthält. Danach werden Wechselwirkungseffekte sowohl in einem allgemeineren Kontext als auch in topologisch nicht-trivialen Systemen behandelt. Außerdem wird das Störstellenmodell nach P. W. Anderson beschrieben, das eines von wenigen numerisch exakt lösbaren Problemen stark korrelierter Elektronen darstellt. Zum Schluss stellen wir die historisch etablierten Gittermodelle nach F. D. M. Haldane und C. L. Kane & E. J. Mele vor.

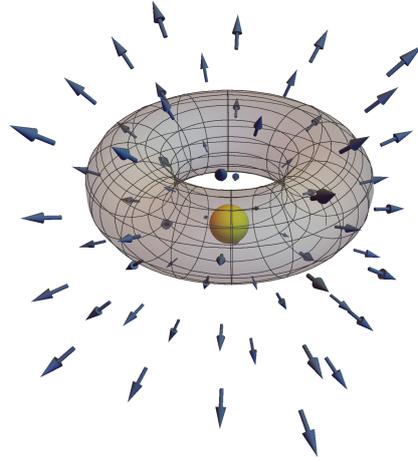


Abbildung 2.2: Magnetischer Monopol (gelbe Kugel) und sein magnetisches Feld im Inneren der torusförmigen Brillouin-Zone.

2.2 Hubbard-Modell

Das Tight-Binding Modell mit Wechselwirkung auf jedem Gitterplatz, benannt nach J. Hubbard [24], dient der Beschreibung von mobilen und stark korrelierten Elektronen in kristallinen Festkörpern. Nachdem es ursprünglich zur Beschreibung von Übergangsmetallen, itinerantem Ferromagnetismus und des Mott-Übergangs entwickelt wurde [25–27], findet es heute darüber hinaus Anwendung in anderen Bereichen des Quantenmagnetismus sowie auch in der Modellierung von Fermi- bzw. Luttinger-Flüssigkeiten [28] und (Hochtemperatur-)Supraleitern [29].

Gitterionen, die sich aus deren Atomkern und den stark an diesen gebundenen Rumpfelektronen zusammensetzen, bilden ein periodisches Gitterpotential für die schwach gebundenen Valenzelektronen, die in zweiter Quantisierung durch fermionische Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren beschrieben werden können. Sie gehorchen den fermionischen Anti-Kommutatorrelationen

$$\{c_i, c_j^\dagger\} = \delta_{ij} \quad (2.7a)$$

$$\{c_i, c_j\} = \{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} = 0. \quad (2.7b)$$

Hubbards vereinfachender Annahme, dass Wechselwirkungen zwischen Elektronen stärkstmöglich lokal sind, also nur auf demselben Gitterplatz wirken, liegen starke Abschirmeffekte der Coulomb-Wechselwirkung zugrunde. Üblicherweise nimmt man

den Überlapp der Atomorbitale als hinreichend klein an, sodass nur Nächst-Nachbar-Hüpfprozesse beitragen. Damit ergibt sich für den hier betrachteten Hubbard-Hamilton-Operator

$$H_{\text{Hubbard}} = \underbrace{-t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma}}_{H_0} + \underbrace{\frac{U}{2} \sum_{i,\sigma} \left(c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} - \frac{1}{2} \right) \left(c_{i,-\sigma}^\dagger c_{i,-\sigma} - \frac{1}{2} \right)}_{H_U}. \quad (2.8)$$

Sein wechselwirkungsfreier Anteil H_0 kann leicht durch Fouriertransformation gelöst werden. Es existiert eine große Bandbreite an Näherungsmethoden zur analytischen und numerischen Behandlung des wechselwirkenden Problems, obwohl keine allgemeine Lösung des vollen Hamilton-Operators (2.8) bekannt ist [30]. Neben der Ausnutzung kontinuierlicher Symmetrien, spielt die sogenannte Teilchen-Loch-Symmetrie in bipartiten Gittern eine besondere Rolle [25]. Bedingt durch das Pauli-Verbot besitzt ein Loch im voll besetzten Gitter abgesehen von seiner elektrischen Ladung die gleichen Eigenschaften wie ein einzelnes Elektron im „leeren“ System, so dass der Hamilton-Operator bei Halbfüllung unter der Transformation

$$c_{i,\sigma}^\dagger \longrightarrow (-1)^i c_{i,\sigma} \quad (2.9a)$$

$$c_{i,\sigma} \longrightarrow (-1)^i c_{i,\sigma}^\dagger \quad (2.9b)$$

invariant ist. Das relative Vorzeichen zwischen benachbarten Gitterplätzen berücksichtigt die fermionische Statistik der c -Operatoren. Unter Ausnutzung der Teilchen-Loch-Symmetrie kann die Dimension des Hilbert-Raums des betrachteten Problems erheblich reduziert werden.

Im Hubbard-Modell konkurrieren Hüpfprozesse mit Amplitude t und Coulomb-Abstoßung der Stärke U miteinander. Der eine Grenzfall $U \rightarrow 0$ beschreibt ein freies Fermi-Gas und der andere Grenzfall $U \rightarrow \infty$ verhindert bei Halbfüllung Elektronenbewegung, da der für eine Doppelbesetzung notwendige Energiebeitrag U nicht mehr aufgebracht werden kann. Es handelt sich also um eine isolierende Phase, den Mott-Isolator [31]. Zwischen diesen beiden Grenzfällen muss dann ein Phasenübergang existieren. Im nächsten Abschnitt wenden wir uns nun genauer dem wechselwirkenden Teil H_U des Hubbard-Hamilton-Operators zu.

2.2.1 Wechselwirkung im Hubbard-Modell

Eine allen Vielteilchenproblemen gemeinsame Schwierigkeit besteht in der Behandlung der Wechselwirkung, die im Allgemeinen nicht mathematisch rigoros gelöst werden kann. Allerdings existiert mit dem Bethe-Ansatz [30] eine exakte Lösung des vollen Hubbard-Modells in einer Raumdimension. Diese stellt jedoch einen Spezialfall dar, deren Techniken nicht ohne Weiteres auf beliebige Dimensionen verallgemeinert werden können. Stattdessen werden Wechselwirkungsanteile oft perturbativ, z. B. feldtheoretisch im Rahmen der diagrammatischen Störungstheorie, behandelt und ein dem konkreten Problem angepasstes Trunkierungsschema limitiert die Anzahl der zur Berechnung

verwendeten Beiträge. Unendliche Störungsreihen können unter Ausnutzung von Symmetrien in relevante und irrelevante Anteile zerlegt und trunziert werden [32,33]. Im Fall von Spinsystemen spielen beispielsweise $U(1)$ - und $SU(2)$ -Symmetrien eine entscheidene Rolle, aber auch diskrete Drehsymmetrien des zugrundeliegenden Gittersystems, seine Translationsinvarianz oder Teilchen-Loch-Symmetrie können zur Klassifikation herangezogen werden [25,34]. Die Kunst liegt in der Identifikation eben jener Beiträge, die die entscheidenden physikalischen Prozesse inkorporieren. Wechselwirkungseffekte können ein entscheidender Motor für neue, interessante Physik sein. Der Ausdruck „More is different“, geprägt von P. W. Anderson [35], steht für den Reichtum effektiver Niederenergie-theorien in Vielteilchensystemen, in denen emergente Phänomene, neue Quasiteilchen und Phasen mit exotischen Eigenschaften auftreten. Die Anwendung gut verstandener fundamentaler Physik benötigt im komplexen Zusammenspiel makroskopisch vieler Freiheitsgrade neue nicht-triviale Modelle.

Im Kontext der Fermi-Flüssigkeiten lässt sich beispielsweise das Konzept der effektiven Masse, also einer Renormierung der Elektronenmasse durch Wechselwirkungseffekte, und eine endliche Lebensdauer des Elektron-Quasiteilchens verstehen. Letztere ist mit der Verbreiterung der Delta-Peaks der Spektralfunktion zu einer Lorenz-Kurve durch die Selbstenergie verbunden [31,33]. Aber auch exotische Anregungen, Anyonen genannt, die sich durch eine Statistik, die weder bosonischer noch fermionischer Natur ist, von den uns bekannten Elementarteilchen unterscheiden, sind bekannt [20].

Gemeinsam ist den genannten Anregungen, dass ihre Umgebung nicht mikroskopisch beschrieben wird, sondern nach einem reduktionistischen Prinzip der kollektive Zustand niedrigster Energie als Vakuum-Zustand definiert wird. Die Anregungen über diesem Grundzustand und ihre Dynamik können durch die Spektralfunktion und die damit verknüpfte Green-Funktion beschrieben werden. Letztere kann in ihrer Hilbert-Darstellung durch die Spektraldarstellung der Zustandsdichte

$$G_{ij}^{\text{ret}}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho_{ij}(x)}{\omega - x + i0^+} dx \Leftrightarrow G_{ij}^{\text{ret}}(\omega) \equiv -i \int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} \left\langle [c_i^\dagger(t), c_j(0)]_{\mp} \right\rangle \quad (2.10a)$$

$$\rho_{ij}(x) = \frac{1}{Z} \sum_{m,n} \left(e^{-\beta E_m} \mp e^{-\beta E_n} \right) \langle m | c_i^\dagger | n \rangle \langle n | c_j | m \rangle \delta(x - (E_n - E_m)) \quad (2.10b)$$

$$\begin{aligned} & \stackrel{\beta \rightarrow \infty}{=} \sum_n \langle n | c_i^\dagger | 0 \rangle \langle 0 | c_j | n \rangle \delta(x - (E_n - E_0)) \\ & \mp \sum_m \langle 0 | c_i^\dagger | m \rangle \langle m | c_j | 0 \rangle \delta(x + (E_m - E_0)) \end{aligned} \quad (2.10c)$$

ausgedrückt werden [33]. Wir beschränken uns nun auf den für diese Arbeit relevanten fermionischen Fall, in dem in Gl. (2.10a) der Anti-Kommutator verwendet wird. Außerdem betrachten wir die Spektralfunktion $\rho_{ij}(x)$ im Grenzfall verschwindender Temperatur $\beta \rightarrow \infty$, da wir den Einfluss thermischer Effekte ausschließen wollen. Die (freie) Zustandsdichte kann außerdem über

$$\rho_0(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_0(\omega + i0^+) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho_0(x)}{\omega - x + i0^+} dx, \quad (2.11)$$

wieder aus der Green-Funktion gewonnen werden. Diesen Sachverhalt wollen wir nutzen, um Wechselwirkungseffekte über die Selbstenergie zu berücksichtigen. Die Selbstenergie inkorporiert den Einfluss von Wechselwirkung, welche Quantenphasenübergänge induzieren kann. Sie ist ein zentrales Werkzeug in der Behandlung von Korrelationen und wird über die Dyson-Gleichung

$$\Sigma(\omega) = G_0^{-1}(\omega) - G^{-1}(\omega) \Rightarrow G(\omega) = G_0(\omega - \Sigma(\omega)) \quad (2.12)$$

aus freier und wechselwirkender Green-Funktion bestimmt, wobei die rechte Seite von (2.12) hier eine lokale Näherung mit skalarer Selbstenergie $\Sigma(\omega)$ impliziert, die linke Seite jedoch allgemeiner für Matrixdarstellungen von Green-Funktionen und Selbstenergie gilt. Damit kann eine wechselwirkende Zustandsdichte

$$\rho_U(\omega) \equiv \rho_0(\omega - \Sigma(\omega)) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho_0(x)}{\omega - \Sigma(\omega) - x + i0^+} dx \quad (2.13)$$

definiert werden. Zwischen den Grenzfällen metallischen Verhaltens und dem Mott-Isolator im Hubbard-Modell existiert eine kritische Wechselwirkungsstärke U_c , die in der Zustandsdichte $\rho_{U>U_c}(\omega)$ eine Bandlücke erzeugt. Sie hängt von der Geometrie des betrachteten Gittersystems ab und ist größer, je leichter Elektronenbewegung stattfinden kann, z. B. bei einer größeren Zahl nächster Nachbar-Gitterplätze. So deuten verschiedene Methoden zur Berechnung der kritischen Wechselwirkungsstärke auf dem Quadratgitter auf eine untere Schranke im Bereich $U_c/t \approx 4.6$ [36], die deutlich oberhalb des Vergleichswerts für das Bienenwabengitter $U_c/t \approx 3 - 4$ [37, 38] liegen. Ein weiteres wichtiges und oft verwendetes exakt lösbares System mit Wechselwirkung stellt das Anderson-Störstellen-Modell dar, das einen einzelnen Platz mit Hubbard-Wechselwirkung um mehrere nicht-korrelierte Plätze erweitert.

2.2.2 Anderson-Störstellen-Modell

Andersons Störstellen-Modell (auch **Single Impurity Anderson Model**) wird besonders zur theoretischen Beschreibung von quasi-nulldimensionalen Quantenpunkten auf einem Substrat herangezogen. Es besteht aus einem zentralen korrelierten Platz, der mit einer beliebigen Anzahl $n_b = n_s - 1$ an unkorrelierten Badplätzen hybridisiert und wird durch den Hamilton-Operator

$$\begin{aligned} H^{\text{SIAM}} = \varepsilon_0 \sum_{\sigma} c_{\sigma}^{\dagger} c_{\sigma} + U \left(c_{\uparrow}^{\dagger} c_{\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(c_{\downarrow}^{\dagger} c_{\downarrow} - \frac{1}{2} \right) \\ + \sum_{\sigma, i=1}^{n_s-1} \varepsilon_i a_{i\sigma}^{\dagger} a_{i\sigma} + \sum_{\sigma, i=1}^{n_s-1} \left(V_i c_{\sigma}^{\dagger} a_{i\sigma} + \text{h.c.} \right) \end{aligned} \quad (2.14)$$

beschrieben [39]. Sowohl die Gitterpotentiale der Badplätze ε_i als auch ihre Hybridisierungsstärke mit dem Zentralplatz V_i sind unabhängig voneinander, wie Abbildung 2.3 zeigt. Die fermionischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $a_i^{(\dagger)}$ und $c^{(\dagger)}$ wirken auf den Badplätzen bzw. dem Zentralplatz. Im Spezialfall eines einzelnen Badplatzes

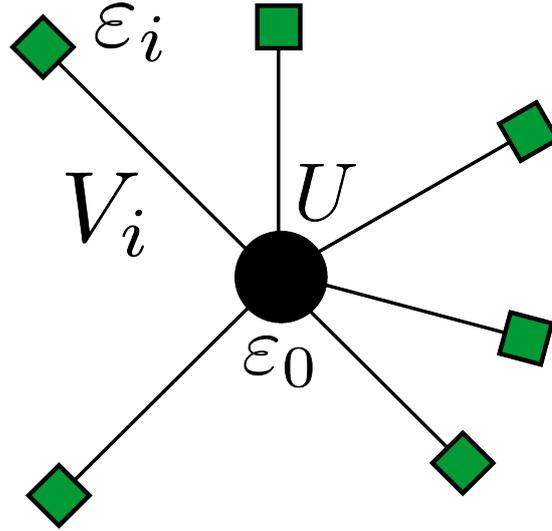


Abbildung 2.3: Ein Anderson-Störstellen-Modell mit $n_s = 7$ Plätzen. Badplätze sind nur über den zentralen Platz mit Hybridisierungsstärke V_i verbunden. Der zentrale Platz trägt eine On-Site-Wechselwirkung U . Auf allen Plätzen existieren unabhängige On-Site-Potentiale ε_i .

bezeichnen wir die lokalen On-Site-Energien als $\varepsilon_{c/a}$ gemäß der auf ihnen wirkenden Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren. Die lokalen Green-Funktionen der Badplätze sind im SIAM durch die freien Propagatoren

$$G'_{i \neq 0}(\omega)^{-1} = \omega + \mu - \varepsilon_i \quad (2.15)$$

gegeben. Lediglich der Zentralplatz enthält die Wechselwirkung über die Selbstenergie und in seiner lokalen Green-Funktion

$$G'_0(\omega)^{-1} = \omega + \mu - \varepsilon_0 - \Delta(\omega) - \Sigma(\omega) \quad (2.16a)$$

$$\Delta(\omega) = \sum_{i=1}^{N_c} \frac{V_i^2}{\omega + \mu - \varepsilon_i} \quad (2.16b)$$

kann die gesamte Information über die Hybridisierung mit den Badplätzen mit Hilfe der sogenannten Hybridisierungsfunktion $\Delta(\omega)$ beschrieben werden [40]. Per Konstruktion liefert die exakte Lösung des Modells eine lokale Selbstenergie mittels Gl. (2.12) und kann daher als Referenzmodell für Systeme mit lokalen Wechselwirkungen dienen. Bei der Behandlung wechselwirkender Gittermodelle mit Translationsinvarianz im Rahmen der Dynamischen Molekularfeld-Theorie (DMFT) wird ausgenutzt, dass die Hüpfamplitude t des Hubbard-Modells auf dem hyperkubischen Gitter im Grenzfall unendlicher Dimensionen eine Renormierung $t \rightarrow \frac{t}{\sqrt{2d}}$ also eine Unterdrückung der Elektronenmobilität erfährt [41, 42]. Die Selbstenergie wird so ebenfalls lokal. Unter Annahme, dass dieser Grenzfall noch eine sinnvolle Näherung darstellt, kann das SIAM

numerisch gelöst werden und die Selbstenergie auf das Hubbard-Problem abgebildet werden. Durch Iteration der Dyson-Gleichung ergibt sich ein selbstkonsistentes Verfahren, das bis zur gewünschten Genauigkeit evaluiert werden kann.

2.2.3 Topologische Isolatoren mit Wechselwirkung

Topologische Invarianten, speziell die Chern-Zahl, sind zunächst nur für wechselwirkungsfreie Systeme definiert. Offenbar existiert in realen Materialien aber keine perfekte Unterdrückung der Coulomb-Wechselwirkung, sodass auch in experimentell realisierten topologischen Isolatoren Wechselwirkungsprozesse stattfinden. Die Berry-Phase wird gemäß Gleichung (2.3) durch die Geometrie der Eigenvektoren bestimmt. Die Ganzzahligkeit dieser Größe legt schon nahe, dass Wechselwirkungen in diesem Zusammenhang nicht perturbativ behandelt werden sollten. Metallische Randzustände, die ein wohlbekanntes Phänomen topologischer Isolatoren und potentiell von praktischem Nutzen sind, z. B. in der Signalübertragung, sind in freien Systemen immer vorhanden, basieren jedoch auf den analytischen Eigenschaften der zugrundeliegenden Green-Funktionen, die sich im Allgemeinen mit Wechselwirkung ändern können.

Es existiert eine Formulierung von topologischen Invarianten auf der Basis der Green-Funktion, die für wechselwirkende Systeme Gültigkeit behält [43]. Die Chern-Zahl wird hier durch Frequenz- und Kristallimpuls-Integrationen über wechselwirkende Green-Funktionen und ihre Inversen bestimmt, was die Kenntnis dieser Größen mit hinreichender Genauigkeit über ein großes Frequenzspektrum voraussetzt. Die Chern-Zahl kann sich in An- und Abwesenheit von Wechselwirkung unstetig an Grenzflächen zwischen Isolatoren mit verschiedenen topologischen Eigenschaften ändern und im nicht wechselwirkenden Fall impliziert dies lückenlose Anregungen auf der Grenzfläche. Nimmt die wechselwirkende Green-Funktion nun aber eine Nullstelle auf der Grenzfläche an, existieren keine Randzustände mehr, obwohl sich die Topologie der beiden Systeme weiterhin ändert. Eine topologische Charakterisierung aufgrund von Bulk-Eigenschaften des Systems ist also bevorzugt gefragt.

Im Kontext sogenannter „topologischer Hamilton-Operatoren“ konnte gezeigt werden [44], dass zur topologischen Klassifikation die Betrachtung des gesamten Frequenzspektrums überflüssig ist, da alle zur Berechnung der Chern-Zahl nötige Information bereits in der Null-Frequenz-(NF-)Green-Funktion $G(\omega = 0, k)$ enthalten ist. Als topologischer Hamilton-Operator $h_{\text{top}}(k)$ wird die inverse Green-Funktion bei $\omega = 0$ bezeichnet und er kann durch die Selbstenergie

$$h_{\text{top}}(k) \equiv -G^{-1}(\omega = 0, k) \quad (2.17a)$$

$$h_{\text{top}}(k) = h_0(k) + \Sigma(\omega = 0, k) \quad (2.17b)$$

und den freien Hamilton-Operator $h_0(k)$ bei $\omega = 0$ ausgedrückt werden. Die Eigenwerte und -zustände von h_{top} haben keine direkte physikalische Bedeutung und sind lediglich zur Berechnung topologischer Invarianten geeignet. Sie sind nicht mit einer bloßen

Renormierung der Bandstruktur zu verwechseln, wie sie durch einen frequenzabhängigen Selbstenergieterm in einem selbstkonsistenten Eigenwertproblem

$$[h_0(k) + \Sigma(\omega_i, k)] |\psi_i(k)\rangle = \omega_i(k) |\psi_i(k)\rangle \quad (2.18)$$

verursacht würde. Das Spektrum und seine Quasiteilchen werden hingegen von ω_i und $|\psi_i(k)\rangle$ als effektive Theorie beschrieben. Der topologische Hamilton-Operator (2.17a) kann verwendet werden, um Chern-Zahlen in einer diskretisierten Brillouin-Zone numerisch zu berechnen. Obwohl durch die Bulk-Topologie festgelegt, werden lückenlose Anregungen auf den Grenzflächen zwischen zwei Isolatoren mit unterschiedlicher Chern-Zahl durch den topologischen Hamilton-Operator identifiziert, wie Wang & Yan für einen generischen Hamilton-Operator der Form $h_{\text{top}} \approx -i\sigma^x \partial_\alpha + \sigma^z m_{\text{top}}(\alpha)$ mit reellem Parametersatz α durch Betrachtung eines Eigenzustands $|\psi^0\rangle$ mit

$$h_{\text{top}} |\psi^0\rangle = 0 \quad (2.19)$$

zeigen konnten. Dies stellt eine direkte Manifestation der Bulk-Edge-Correspondence dar.

Die wohl herausragendste Bulk-Eigenschaft eines elektronischen Systems ist, sofern vorhanden, seine Bandlücke. Da sich die Chern-Zahl eines Systems nur nicht-adiabatisch durch Schließen und Öffnen der Bandlücke ändern kann, liegt die Frage auf der Hand, ob dies, wie im Fall des Mott-Isolators, durch Wechselwirkungen induziert werden kann. Wir untersuchen inwiefern die Selbstenergie die Bandstruktur modifizieren und kritisches Verhalten durch Wechselwirkung induziert werden kann, sodass die Chern-Zahl geändert wird. Dazu soll nun zunächst eines der bekanntesten Modelle mit topologisch nicht-trivialen Eigenschaften bei Abwesenheit von Wechselwirkung diskutiert werden. Am Beispiel des Haldane-Modells wollen wir ein topologisches Phasendiagramm vorstellen und uns besonders die Rolle verschiedener Symmetrien und ihren Einfluss auf die Energielücke klarmachen.

2.3 Haldane-Modell

Mit der experimentellen Realisierung topologischer Isolatoren im Jahr 2007 [45] stieg auch das theoretische Interesse an Haldanes Modell und die Anzahl der Folgearbeiten rasant an und ist seitdem ausgesprochen groß. Anhand des Haldane-Modells sollen in diesem Abschnitt grundlegende Konzepte der topologischen Bandtheorie erläutert werden. Dazu werden keine Wechselwirkungen behandelt, sondern besonders die Rolle von diskreten Symmetrien und die Phänomenologie dieser Systeme diskutiert.

Motiviert wurde diese Überlegung durch den ganzzahligen Quanten-Hall-Effekt, der im freien Elektronengas bei Anlegen eines externen Magnetfeldes durch Auffüllen sogenannter Landau-Levels beobachtet werden kann [46]. Im Jahre 1988 entwickelte Haldane sein Modell zur Beschreibung des anomalen Quanten-Hall-Effekts auf dem Bienenwabengitter ohne externes Magnetfeld, indem er einen komplexen Hüpfterm zwischen übernächsten Nachbarn einführt, das die Zeitumkehrinvarianz brechen kann,

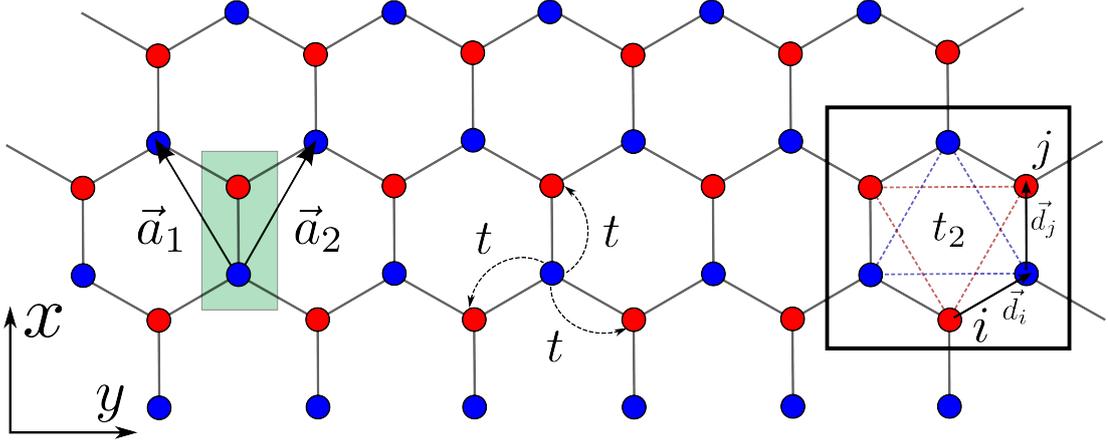


Abbildung 2.4: Das zweidimensionale Bienenwabengitter hat eine Einheitszelle mit zwei Plätzen (links). Außerdem sind die Gittervektoren $\vec{a}_{1,2}$ zu sehen. Hüpfprozesse mit Amplituden t und t_2 sind im Ausschnitt illustriert.

ähnlich wie es ein externes Magnetfeld täte [47]. Wir wollen den wechselwirkungsfreien Haldane-Hamilton-Operator

$$H_0^{\text{Haldane}} = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + t_2 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle \sigma} e^{-i\nu_{ij}\phi} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + M \sum_{i\sigma} (-1)^i c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \quad (2.20)$$

mit reellen Parametern t, t_2, ϕ, M und $\nu_{ij} = \text{sgn}(\vec{d}_i \times \vec{d}_j)$ betrachten. Mit $\langle\langle \cdot \rangle\rangle$ werden Übernächste-Nachbar-Plätze beschrieben und $\vec{d}_i, \vec{d}_j \in \{\vec{\delta}_{1,2,3}\}$ sind die beiden nächsten Verbindungsvektoren von Platz i zu Platz j über ihren gemeinsamen nächsten Nachbarn. Eine Illustration der geometrischen Anordnung gibt Abbildung 2.4. Durch Fouriertransformation kann H_0^{Haldane} in der Basis der Pauli-Matrizen $\{\sigma_\alpha\}$ mit $\alpha \in \{0, 1, 2, 3\}$ geschrieben werden.

$$H_0^{\text{Haldane}}/t = \sum_k c_k^\dagger h(k) c_k \quad \text{mit} \quad h(k) = \sum_\alpha \sigma_\alpha s^{(\alpha)}(k) \quad (2.21a)$$

$$s^{(0)}(k) = 2t_2(\cos(\phi)(\cos(ka_1) + \cos(ka_2) + \cos(k(a_1 - a_2)))) \quad (2.21b)$$

$$s^{(1)}(k) = \cos(ka_1) + \cos(ka_2) + 1 \quad (2.21c)$$

$$s^{(2)}(k) = \sin(ka_1) + \sin(ka_2) \quad (2.21d)$$

$$s^{(3)}(k) = M + 2t_2 \sin(\phi)(\sin(ka_1) - \sin(ka_2) - \sin(k(a_1 - a_2))) \quad (2.21e)$$

Anhand dieser Darstellung diskutieren wir die Inversions- und Zeitumkehrsymmetrie des Systems. Die Hüpfamplitude t bestimmt die Energieskala des Systems, sodass formal $t = 1$ gesetzt wird. Zeitumkehrinvarianz spielt in der Behandlung topologisch

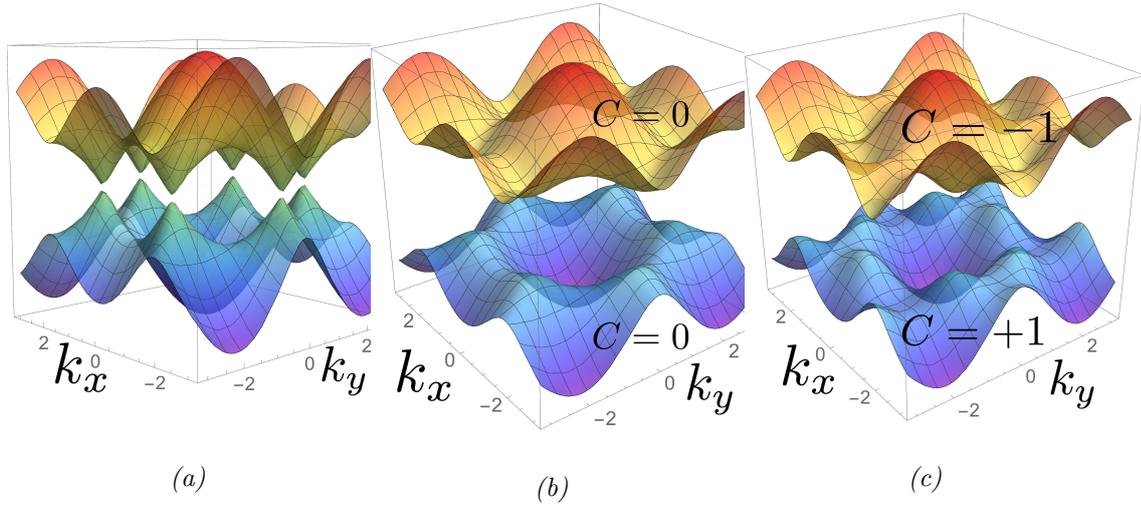


Abbildung 2.5: Bandstruktur des Haldane-Modells. (a) $t_2 = \phi = M = 0$: Dirac-Kegel an den Punkten K, K' und ihren C_3 -Symmetriepartnern (vgl. Appendix A.1); (b) $t_2 = \phi = 0, M/t = 1$: Ein endlicher Massenterm öffnet eine Bandlücke. Die Bänder sind topologisch trivial $C = 0$; (c) $t_2/t = 0.3, \phi = \pi/2, M/t = 0.2$ Die Bandlücke entsteht durch Übernächst-Nachbar-Hüpfen. Die Bänder tragen nun endliche Chern-Zahlen $C_n = \pm 1$.

nicht-trivialer Systeme eine zentrale Rolle. Die Chern-Zahl kann nur dann endliche Werte annehmen, wenn diese diskrete Symmetrie

$$\mathcal{T} : (x, p) \rightarrow (x, -p) \quad (2.22)$$

$$T h(k) T^{-1} = h(-k) \Rightarrow h^*(k) = h(-k) \quad (2.23)$$

gebrochen wird, da die Berry-Feldstärke $F_n(\vec{k})$ ungerade in \vec{k} ist. Zur Erhaltung von \mathcal{T} müssen nun $s^{(2)}(-k) = -s^{(2)}(k)$ ungerade und $s^{(0)}(k) = s^{(0)}(-k), s^{(1)}(k) = s^{(1)}(-k), s^{(3)}(k) = s^{(3)}(-k)$ gerade Funktionen in k sein. Es ist leicht ersichtlich, dass $s^{(3)}$ nur gerade sein kann, falls $\phi \in \{0, \pi\}$. Ist $\phi \neq 0, \pi$ wird \mathcal{T} gebrochen wie man es auch im analogen Fall eines externen Magnetfeldes erwarten würde. Die Bedingungen zur Inversionssymmetrie

$$\mathcal{I} : (x, y) \rightarrow (-x, -y) \quad (2.24)$$

$$I H I^{-1} = H \Rightarrow h(k) = \sigma_1 h(-k) \sigma_1 \quad (2.25)$$

lauten $s^{(2)}(-k) = -s^{(2)}(k)$ und $s^{(3)}(k) = -s^{(3)}(-k)$ ungerade und $s^{(0)}(k) = s^{(0)}(-k), s^{(1)}(k) = s^{(1)}(-k)$ gerade, sodass ein Massenterm $M \neq 0$ genau für den Bruch von \mathcal{I} verantwortlich ist.

Eine Besonderheit der Bandstruktur des Bienenwabengitters besteht in der Existenz von Dirac-Punkten (Abbildung 2.5a). Die C_3 -Symmetrie des Gitters legt Punkte K

und K' fest, an denen die Dispersion linear verschwindet. Die Bandstruktur bildet sogenannte Dirac-Kegel. Solange \mathcal{T} und \mathcal{I} ungebrochen sind, sind diese Punkte robust gegen kleine Störungen. Wird C_3 gebrochen, z. B. durch anisotrope Hüpfamplituden, ist die Position dieser Punkte nicht mehr festgelegt. Sie können sich frei bewegen und solche mit entgegengesetzter Berry-Phase sogar an \mathcal{T} -invarianten Punkten annihilieren [15]. Außerdem sei bemerkt, dass Teilchen-Loch-Symmetrie nach Gl. (2.9b) bei endlichem t_2 nur bei gleichzeitiger Transformation der Phase $\phi \rightarrow \pi - \phi$ und Inversion des Massenterms $M \rightarrow -M$ gegeben ist. Das Haldane-Modell fällt in Klasse A des Periodensystems topologischer Isolatoren und Supraleiter [5, 6].

Um die Niederenergiephysik des Systems zu verstehen, kann der Hamilton-Operator in linearer Ordnung um diese Punkte entwickelt werden:

$$h(K + \kappa) \approx s^{(0)}(K) + \sum_{j=1,2} \kappa_j \partial_{\kappa_j} s^{(0)}(\kappa = K) + \sum_{i=1,2,3} \left(\sigma_i s^{(i)}(K) + \sum_{j=1,2} \kappa_j \partial_{\kappa_j} \sigma_i s^{(i)}(\kappa = K) \right) \quad (2.26a)$$

$$= -3t_2 \cos(\phi) + \frac{3}{2}t_1 (\kappa_2 \sigma_1 - \kappa_1 \sigma_2) + \left(M - 3\sqrt{3}t_2 \sin(\phi) \right) \sigma_3 \quad (2.26b)$$

und analog

$$h(K' + \kappa) \approx -3t_2 \cos(\phi) - \frac{3}{2}t_1 (\kappa_2 \sigma_1 + \kappa_1 \sigma_2) + \left(M + 3\sqrt{3}t_2 \sin(\phi) \right) \sigma_3. \quad (2.26c)$$

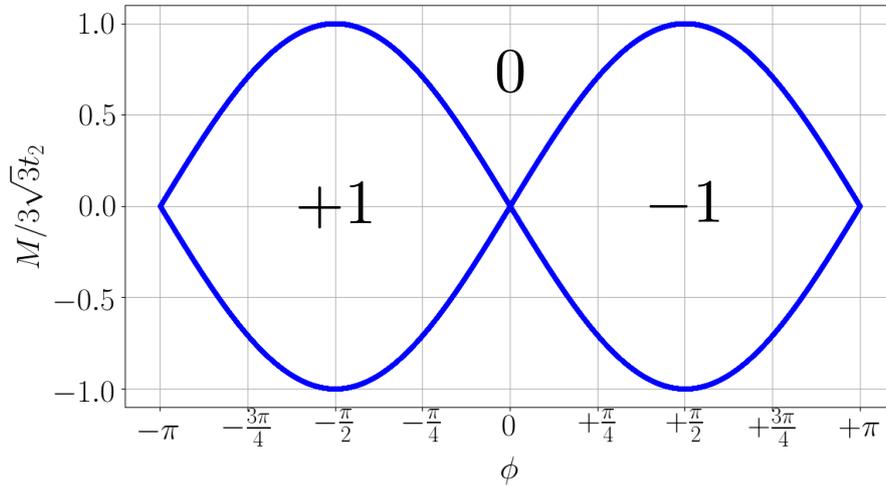


Abbildung 2.6: Phasendiagramm des Haldane-Modells mit Chern-Zahlen des Leitungsbandes in jeder Phase.

Es kann durch Betrachtung der Gln. (2.26b) und (2.26c) bei $\kappa = 0$ gezeigt werden, dass die Bandlücke für

$$M = \pm 3\sqrt{3}t_2 \sin(\phi) \quad (2.27)$$

schließt. Abbildung 2.6 zeigt das Phasendiagramm des Haldane-Modells. Die verschiedenen Phasen unterscheiden sich *nicht* durch kontinuierliche Symmetrien, sondern durch verschiedene Werte der Chern-Zahl. Sie werden also nicht durch Landaus Theorie der spontanen Symmetriebrechung beschrieben. Da im Haldane-Modell kein externes Magnetfeld anliegt, liegen auch keine Landau-Levels vor, mit deren Besetzung die Quantisierung der Hall-Leitfähigkeit erklärt werden kann. Im Rahmen der linearen Antwort-Theorie wird die Hall-Leitfähigkeit bei Anlegen eines elektrischen Feldes zu

$$\sigma_{xy} = \frac{j_H}{E} = \frac{e^2}{h} \sum_n C_n \quad (2.28)$$

wobei die Summe über alle gefüllten Bänder läuft [47]. Die Hall-Leitfähigkeit wird also durch die Chern-Zahlen dieser Bänder bestimmt und stellt eine direkte experimentell nachweisbare Konsequenz der topologischen Bandtheorie dar.

Des Weiteren sind die für topologischen Isolatoren typischen Randzustände von theoretischem und experimentellem Interesse. Dazu beschreiben wir ein in eine Raumrichtung unendlich ausgedehntes, in die andere jedoch endlich großes Bienenwabengitter mit Ausdehnung L_x bei $L_y \rightarrow \infty$. Die Bandstruktur dieses quasi-eindimensionalen Systems mit Einheitszelle der Größe L_x ergibt sich durch eine Kombination aus exakter Diagonalisierung in x - und Fouriertransformation in y -Richtung und zeigt bei korrekter Parameterwahl in der $C_n = 0$ -Phase die erwartete Bandlücke. In den beiden anderen topologisch nicht-trivialen Phasen wird diese Bandlücke von einzelnen metallischen Bändern durchkreuzt, die im Haldane-Modell nur bei Bruch der Zeitumkehrinvarianz auftreten können. Sie beschreiben chirale Randzustände, die sich in entgegengesetzte Richtungen entlang der beiden Ränder des Systems bewegen. Die Verknüpfung von Bulk-Eigenschaften, d. h. der endlichen Chern-Zahl, und der Präsenz von Randzuständen wird „Bulk-Edge-Correspondence“ genannt [48]. Wir wollen die Eigenschaften dieser Randzustände im Kontext des Kane-Mele-Modells genauer diskutieren. Im Gegensatz zu den chiralen Randzuständen des Haldane-Modells, die an jedem Systemrand in eine festgelegte Richtung propagieren, weist dieses Modell helikale Zustände auf.

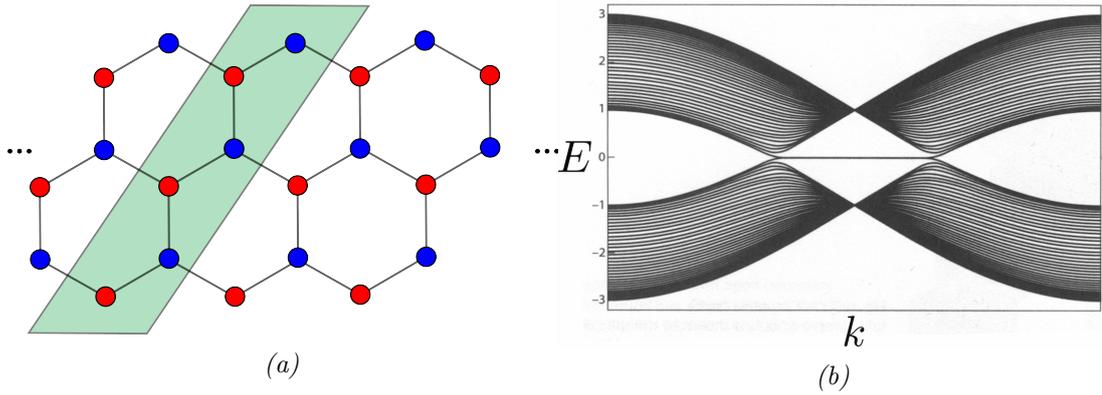


Abbildung 2.7: (a) Ausschnitt aus quasi-eindimensionaler Streifengeometrie mit Einheitszelle der Größe $L_x = 6$, (b) Generische Dispersion $E(k)$ mit $k \in [-\pi, \pi]$ eines Tight-Binding Modells für Graphen mit gerader Anzahl an Plätzen in der Einheitszelle mit Randzuständen, entnommen aus Ref. [15].

2.4 Randzustände und Zeitumkehrinvarianz im Kane-Mele-Modell

Helikale Randzustände sind in Systemen mit ungebrochener Zeitumkehrinvarianz bekannt. An jedem Systemrand existieren zwei entgegengesetzt propagierende Randzustände, deren jeweilige Propagationsrichtung durch die Spinausrichtung bestimmt wird. König et al. realisierten im Jahr 2007 erstmalig zeitumkehrinvariante topologische Isolatoren experimentell in Halbleiter-Quantentöpfen [45]. Das Kane-Mele-Modell [49] bezieht Spin-Bahn-Kopplungseffekte anstelle des für das Haldane-Modell charakteristischen komplexen Übernächst-Nachbar-Hüpfens mit ein. Der Hamilton-Operator lautet

$$\begin{aligned}
 H_0^{\text{KM}} = & -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + i\lambda_{\text{SO}} \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle \sigma} \nu_{ij} c_{i,\sigma}^\dagger s_z c_{j,\sigma} + \lambda_o \sum_{i\sigma} \epsilon_i c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \\
 & + i\lambda_R \sum_{\langle ij \rangle \sigma} c_{i,\sigma}^\dagger (\vec{s} \times \vec{d}_{ij})_z c_{j,\sigma}.
 \end{aligned} \tag{2.29}$$

Zunächst kann das Kane-Mele-Modell als einfache Verdopplung des ursprünglich spinlosen Haldane-Modells für zwei Spinsorten verstanden werden. Der Spin-Bahn-Term λ_{SO} bricht die $SU(2)$ -Spinsymmetrie zu einer $U(1)$, aber weder \mathcal{T} noch \mathcal{I} , sodass für jede Spinsorte eine eigene Spin-Chern-Zahl $C_{\uparrow,\downarrow}$ existiert und S_z eine gute Quantenzahl ist. Die Zeitumkehr-Operation wird im spinvollen Modell zum Operator

$$\mathcal{T} = i\sigma_2 \mathcal{K} \tag{2.30}$$

mit der Pauli-Matrix σ_2 erweitert, der neben der komplexen Konjugation \mathcal{K} (vgl. Gleichung (2.23)) eine Spinsorte in die jeweils andere überführt [15].

Der sogenannte Rashba-Term λ_R , ein weiterer Spin-Bahn-Kopplungseffekt, bricht die S_z -Erhaltung $U(1)$ zu einer \mathbb{Z}_2 -Symmetrie und koppelt die \uparrow - und \downarrow -Unterräume

aneinander. Im fermionischen Fall erfüllt der Zeitumkehroperator $\mathcal{T}^2 = -1$ und das Kramers-Theorem sagt für diesen Fall zwei Zustände mit der gleichen Energie voraus, die über Zeitumkehr miteinander verknüpft $|\psi_{\mathcal{T}}\rangle = \mathcal{T}|\psi\rangle$ und orthogonal sind [15]. Die beiden entgegelaufenden Randzustände bilden ein Kramers-Paar und sind topologisch geschützt. Dies bedeutet, dass sie aufgrund ihrer nicht-trivialen topologischen Eigenschaften robust gegen (kleine) Störungen sind, die nicht in der Lage sind die Bulk-Lücke zu schließen. Bedingt durch Zeitumkehrinvarianz kreuzen die beiden chiralen Randzustände die Fermi-Fläche bei $k = 0$. In diesen Modellen kann aus Symmetriegründen keine Chern-Zahl $\in \mathbb{Z}$ definiert werden. Es existiert aber eine topologische \mathbb{Z}_2 -Invariante ν , die sich in der Anzahl der Kreuzungen der Randzustände mit der Fermi-Fläche manifestiert. Bei einer geraden Anzahl an Kreuzungen liegt ein trivialer Isolator mit $\nu = 0$ vor, ungerade Kreuzungen korrespondieren zu $\nu = 1$ und weisen auf nicht-triviale Topologie hin. Der Rand eines wechselwirkungsfreien Bulk-Isolators mit nicht-trivialer Topologie wird also per Bulk-Edge-Correspondence immer lückenlose Randzustände beherbergen.

Nachdem wir uns einen Überblick über das Feld der topologischen Bandtheorie und ihrer Erweiterung auf wechselwirkende Probleme verschafft haben, widmen wir uns im Folgenden der in dieser Arbeit verwendeten Methoden zur Untersuchung des zweidimensionalen Bienenwabengitters. Mit der sogenannten Selbstenergiefunktional-Theorie wird eine Methode zur Behandlung von Wechselwirkungseffekten vorgestellt, die die topologischen Eigenschaften des Systems respektiert.

3 Methoden

In diesem Kapitel werden die für diese Arbeit relevanten Methoden erläutert. Wir beginnen mit einer kurzen Zusammenfassung der Theorie des großkanonischen Ensembles, das die Basis für die Anwendbarkeit der darauf folgenden Selbstenergiefunktional-Theorie (SFT) bildet [50]. In diesem Kontext besprechen wir einige populäre Quanten-Cluster-Methoden und stellen die lokalen Näherungen in der hier verwendeten dynamischen Störstellen Approximation (DIA) vor. Die numerische Implementierung der SFT und ein analytisch handhabbarer Spezialfall der DIA werden erläutert. Danach werden einige Details zur exakten Diagonalisierung und der numerischen Berechnung von lokalen Zustandsdichten beschrieben. Zum Schluss stellen wir eine numerisch effiziente Methode zur Berechnung von Chern-Zahlen bei grober Diskretisierung der Brillouin-Zone vor.

3.1 Das großkanonische Ensemble

Unter einem Ensemble versteht man in der Thermodynamik die Gesamtheit aller Mikrozustände eines Vielteilchensystems, die zum selben Makrozustand korrespondieren. Die Thermodynamik von Quantensystemen, die sich im Energie- und Teilchenaustausch mit ihrer Umgebung befinden, wird durch das großkanonische Ensemble erfasst. Dies ist für viele Systeme die natürlichste Wahl, da das betrachtete System oft beispielsweise Photonen in Form von Strahlung oder Gitterschwingungen, im Quasiteilchenbild also Phononen, aber auch Elektronen mit seiner Umgebung austauscht und perfekte Isolation praktisch niemals möglich ist. Die Kontrollparameter Temperatur T und chemisches Potential μ der fluktuierenden Größen Energie E und Teilchenzahl N bilden zusammen mit dem Systemvolumen V die natürlichen Variablen im großkanonischen Potential. Die großkanonische Zustandssumme Z definiert das großkanonische Potential Ω und den Dichteoperator ρ

$$Z = \text{tr} e^{-\beta \mathcal{H}} \quad (3.1a)$$

$$\Omega = -\beta^{-1} \ln(Z) \quad (3.1b)$$

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta \mathcal{H}} \quad \text{wobei} \quad \mathcal{H} = H - \mu N. \quad (3.1c)$$

Der Term $-\mu N$ wird in die neue Definition des Hamilton-Operators \mathcal{H} aufgenommen und $\beta = (k_B T)^{-1}$ stellt die inverse Temperatur dar. Mit dem Dichteoperator ρ können durch Spurbildung Erwartungswerte von Observablen

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \text{tr} (\rho \mathcal{O}) \quad (3.2)$$

bestimmt werden. Alternativ werden Erwartungswerte einer linear angekoppelten Observable durch die Ableitung nach ihrem Lagrange-Multiplikator gebildet, zum Beispiel im Fall der mittleren Teilchenzahl

$$\langle N \rangle = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}. \quad (3.3)$$

Für die Entropie gilt

$$\Omega = \langle \mathcal{H} \rangle - TS \Leftrightarrow S = -\frac{\partial \Omega}{\partial T}. \quad (3.4)$$

Sie ist im thermodynamischen Gleichgewicht maximal, das Potential Ω minimal. Da wir im Rahmen der Selbstenergiefunktional-Theorie verschiedene Vielteilchensysteme in zweiter Quantisierung miteinander in Beziehung stellen und speziell Teilchenaustausch unter diesen zulassen, verwenden wir das großkanonische Ensemble. Das großkanonische Potential und seine Minimierung stellt die zentrale Größe für die Betrachtungen der nun folgenden Selbstenergiefunktional-Theorie dar.

3.2 Selbstenergiefunktional-Theorie

Die Selbstenergiefunktional-Theorie, erstmals eingeführt von M. Potthoff im Jahr 2003 [50], stellt eine thermodynamisch konsistente Methode zur approximativen Lösung stark korrelierter Vielteilchensysteme dar. Diese nicht-perturbative Methode verallgemeinert viele bestehende Quanten-Cluster-Methoden und stellt diese auf ein gemeinsames Fundament. Sie ist daher auch von fundamentalem Interesse bei der Behandlung von wechselwirkenden Elektronen.

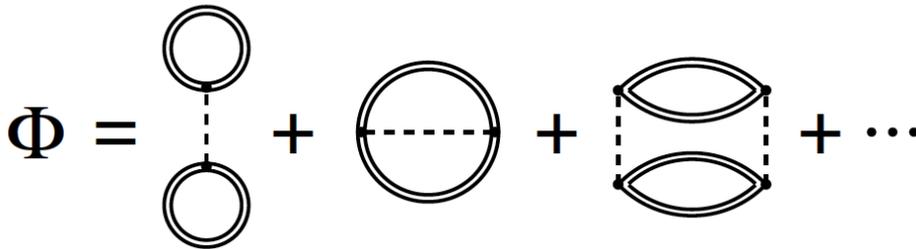


Abbildung 3.1: Das Luttinger-Ward-Funktional ist die Diagrammsumme aller geschlossenen angezogenen Skelett-Diagramme; entnommen aus Ref. [51]

Im Kontext der diagrammatischen Störungstheorie bezeichnet man die Summe aller geschlossenen, zusammenhängenden, angezogenen Skelett-Diagramme als Luttinger-Ward-Funktional, das den Ausgangspunkt der SFT bildet. Es stellt eine Verbindung zwischen statischen und dynamischen Größen – man denke hier an thermodynamische Potentiale auf der einen und Korrelationsfunktionen auf der anderen Seite – her und besitzt einige

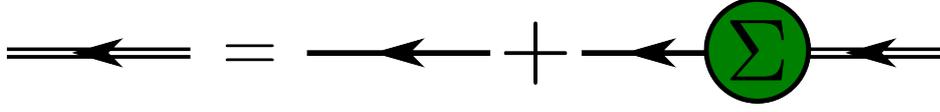


Abbildung 3.2: Diagrammatische Darstellung der Dyson-Gleichung (2.12)

nützliche Eigenschaften zur Verwendung in der Vielteilchentheorie. Die Funktionalableitung nach der Green-Funktion, also das Entfernen eines wechselwirkenden Propagators im Diagramm, ergibt seinen Selbstenergiebeitrag

$$\beta \frac{\delta \Phi[G]}{\delta G} = \Sigma[G]. \quad (3.5)$$

Das Funktional

$$\Omega[G] = \Phi[G] + \text{Tr}(\ln G) - \text{Tr}\left(\left(G_0^{-1} - G^{-1}\right)G\right) \quad (3.6)$$

verknüpft das Luttinger-Ward-Funktional, für das sich im Allgemeinen kein geschlossener analytischer Ausdruck angeben lässt, mit dem großkanonischen Potential Ω . Hierbei bezeichnet „Tr“ die Spurbildung im Matsubara-Formalismus

$$\text{Tr}A = \beta^{-1} \sum_{\sigma} \sum_{\omega} e^{i\omega 0^+} \text{tr}A(i\omega) \quad (3.7)$$

mit der Summe über die fermionischen Matsubara-Frequenzen $\omega \equiv \omega_n = (2n+1)\pi/\beta$ und $n \in \mathbb{Z}$. Das großkanonische Potential aus Gl. (3.6) kann mit Hilfe der Dyson-Gleichung (2.12) als

$$\Omega[\Sigma] = \underbrace{\Phi[G[\Sigma]] - \text{Tr}(\Sigma G[\Sigma])}_{=F[\Sigma]} + \text{Tr}\left(\ln\left(-\left(G_0^{-1} - \Sigma\right)^{-1}\right)\right) \quad (3.8)$$

mit der Legendre-Transformierten $F[\Sigma]$ des Luttinger-Ward-Funktionalen ausgedrückt werden. Die funktionale Abhängigkeit wird dadurch von der Green-Funktion auf die Selbstenergie Σ transformiert. Diese hängt aber nicht von den Ein-Teilchen-Parametern \mathbf{t} des Systems ab, sondern wird allein durch den Wechselwirkungsanteil des Hamilton-Operators H_U festgelegt. Für verschiedene Systeme mit gleichem Wechselwirkungsanteil H_U nimmt $F[\Sigma]$ stets dieselbe Form an. Für zwei Systeme A und B mit der gleichen „freien Energie“ $F[\Sigma]$ kann nun jeweils Gl. (3.8) aufgestellt werden. Durch Subtraktion kann $F[\Sigma]$ eliminiert und eine Beziehung zwischen den Potentialen beider Systeme aufgestellt werden

$$\Omega_A[\Sigma] = \Omega_B[\Sigma] + \text{Tr}\left(\ln\left(-\left(G_{0A}^{-1} - \Sigma\right)^{-1}\right)\right) - \text{Tr}\left(\ln\left(-\left(G_{0B}^{-1} - \Sigma\right)^{-1}\right)\right). \quad (3.9)$$

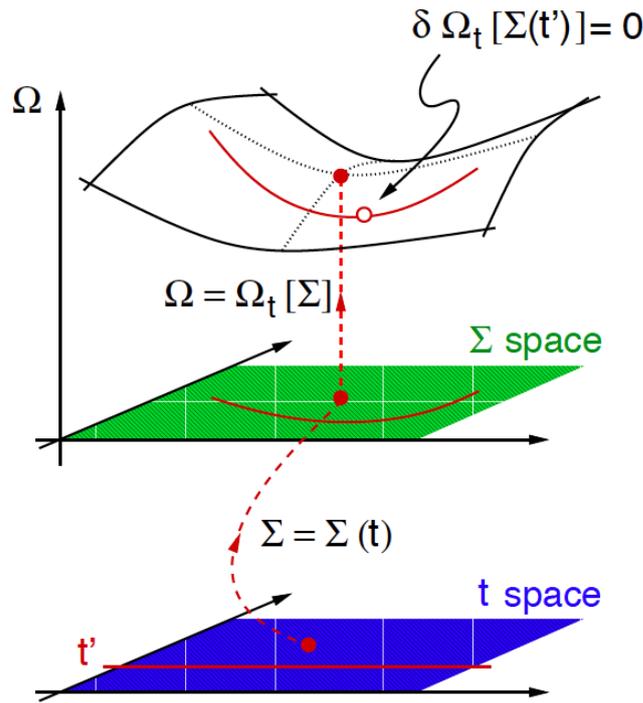


Abbildung 3.3: Veranschaulichung der Abhängigkeit der verwendeten Funktionale. Stationäre Punkte des großkanonischen Potentials werden bei der physikalischen Selbstenergie angenommen; entnommen aus Ref. [51]

Gleichung (3.9) motiviert das Verfahren der SFT. Ein kompliziertes, nicht allgemein lösbares wechselwirkendes System, im Folgenden Ursprungssystem genannt, wird über Gleichung (3.9) mit einem Referenzsystem mit gleichem Wechselwirkungsanteil verknüpft. Potthoff konnte zeigen, dass die physikalische Selbstenergie des Ursprungsystems diejenige ist, für die sich sein großkanonisches Potential an einem Sattelpunkt befindet. Diese Selbstenergie ist also Lösung eines Variationsprinzips $d\Omega = 0$ für das Ursprungssystem. Es sei bemerkt, dass bis zu diesem Punkt keine Näherung vollzogen wurde und Gleichung (3.9) exakt ist. Nun wird die einzige Näherung der SFT erläutert. Das Referenzsystem, im Folgenden auch Cluster genannt, ist üblicherweise ein System mit reduzierter Komplexität, z. B. ohne Translationsinvarianz, sodass es numerisch oder analytisch gelöst und eine Selbstenergie berechnet werden kann. Die Wahl des Referenzsystems beschränkt natürlich den Raum der Selbstenergien, die so berechnet werden können, auf einen Unterraum, der durch die Eigenschaften, z. B. Symmetrien, des Clusters bestimmt wird, im Ursprungssystem aber nicht zwangsläufig gegeben sind. Natürlich hängt die Selbstenergie, die mit Hilfe des numerisch oder analytisch zu lösenden Referenzsystems bestimmt wird, von den Ein-Teilchen-Parametern des Clusters t' ab, die

zur Bestimmung von stationären Punkten variiert werden müssen. Dies veranschaulicht Abbildung 3.3. Wir vereinfachen Gleichung (3.9) zu

$$\Omega[\Sigma] = \Omega'[\Sigma] + \text{Tr} \left(\ln \left(- \left(G_0^{-1} - \Sigma \right)^{-1} \right) \right) - \text{Tr} \left(\ln \left(- \left(G_0'^{-1} - \Sigma \right)^{-1} \right) \right), \quad (3.10)$$

wobei sich die ungestrichenen (gestrichenen) Größen auf das Ursprungssystem (Referenzsystem) beziehen, um die Hierarchie der zu lösenden Probleme zu betonen. Die wechselwirkende Green-Funktion G und exakte Selbstenergie des Ursprungssystems $\Sigma(\mathbf{t})$ sind nicht ohne Weiteres bestimmbar. Die entsprechenden Größen, die aus dem Hamilton-Operator des Referenzsystems H' berechnet werden, dienen als Hilfsgrößen zur Lösung des Ursprungssystems. Das Selbstenergie-Funktional $\Sigma = \Sigma[\mathbf{t}']$ kann im Unterraum der Versuchselbstenergien, die das Referenzsystem liefert, exakt ausgewertet werden. Für die Lösung des Variationsprinzips folgt die Stationaritätsbedingung

$$\frac{\partial \Omega_{\mathbf{t}}[\Sigma(\mathbf{t}')] }{\partial \mathbf{t}'} \stackrel{\text{Gl. (3.10)}}{=} \beta^{-1} \sum_{\omega} \sum_{\alpha\beta} \left(\left(G^{-1} - \Sigma(\mathbf{t}') \right)^{-1} - G' \right)_{\beta\alpha} \frac{\partial \Sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{t}')}{\partial \mathbf{t}'} = 0, \quad (3.11)$$

die trivial erfüllt ist, wenn Ursprungs- und Referenzsystem identisch sind. Weitere Lösungen der Stationaritätsbedingung (3.11) stellen nicht-triviale stationäre Punkte in diesem Unterraum dar, an denen das Selbstenergie-Funktional der physikalischen Selbstenergie $\Sigma(\mathbf{t}')$ entspricht. Es gilt die Äquivalenz des stationären Punktes von $\Omega[\Sigma]$ und der Dyson-Gleichung des Ursprungssystems

$$\frac{\delta \Omega[\Sigma]}{\delta \Sigma} = 0 \Leftrightarrow G[\Sigma] = \left(G_0^{-1} - \Sigma \right)^{-1} \quad (3.12)$$

und lokale Invertierbarkeit von $G[\Sigma]$ ist praktisch immer gegeben [50].

Die beiden Beiträge von Ursprungs- und Referenzsystem zum großkanonischen Potential (3.10) enthalten nicht-triviale Spurbildungen im Matsubara-Formalismus, die mithilfe von komplexer Analysis in reelle Integrationen überführt werden können. Ausgehend von der freien Green-Funktion beinhalten diese Spurbildungen die Hüpfmatrix τ , die die Hüpf-Amplituden t des Ein-Teilchen-Hamilton-Operators enthält. Im zweidimensionalen Fall ist τ die gewichtete Adjazenzmatrix des zugehörigen Gitters. Sie ist beispielsweise im Fall einer Ring-Geometrie des Gitters mit Länge L eine Bandmatrix mit Einträgen auf den ersten Nebendiagonalen und der oberen rechten bzw. unteren linken Ecke

$$\tau = \begin{bmatrix} t_{00} & t_{01} & 0 & \dots & t_{0L} \\ t_{10} & t_{11} & t_{12} & \ddots & \vdots \\ 0 & t_{21} & t_{22} & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & t_{L-1L} \\ t_{L0} & \dots & 0 & t_{LL-1} & t_{LL} \end{bmatrix}. \quad (3.13)$$

Die Spur in Gl. (3.10) wird in ein Frequenz-Integral und eine Summe über die Eigenwerte η_k der Summe aus Hüpfmatrix und Selbstenergie $\tau + \Sigma$ überführt [40]

$$\begin{aligned} & \text{Tr} \left(\ln \left(- \left(G_0^{-1} - \Sigma \right)^{-1} \right) \right) \\ &= \beta^{-1} \sum_{\omega} e^{i\omega 0^+} \text{tr} \ln \frac{-1}{i\omega + \mu - \tau - \Sigma(i\omega)} \end{aligned} \quad (3.14a)$$

$$= -\frac{1}{2\pi i} \sum_k \oint_C d\omega e^{\omega 0^+} f(\omega) \ln(-g_k(\omega)) \quad (3.14b)$$

$$= -\frac{1}{\pi} \sum_k \int_{-\infty}^{\infty} d\omega f(\omega) \text{Im} \ln(-g_k(\omega + i0^+)) \quad (3.14c)$$

$$= -\sum_k \int_{-\infty}^{\infty} d\omega f(\omega) \underbrace{\Theta(\omega + \mu - \eta_k(\omega))}_{\Theta(g_k(\omega))}. \quad (3.14d)$$

Nach partieller Integration enthält der verbleibende Integrand die Ableitung der Heaviside-Funktion, die im distributionellen Sinne der Dirac'schen-Delta-Funktion entspricht. Da das Argument der Heaviside-Funktion durch seinen Kehrwert ersetzt werden kann ohne den Funktionswert zu ändern, geben ihre Ableitungen Beiträge sowohl bei Nullstellen ω_m , als auch bei Polen ζ_n von $\omega + \mu + \eta_k(\omega)$. Damit erhalten wir

$$\begin{aligned} & \text{Tr} \left(\ln \left(- \left(G_0^{-1} - \Sigma \right)^{-1} \right) \right) \\ &= -\sum_k \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \beta^{-1} \ln(1 + e^{-\beta\omega}) \frac{d\Theta(\omega + \mu - \eta_k(\omega))}{d\omega} \end{aligned} \quad (3.14e)$$

$$= -L \sum_{\sigma} \left(\sum_m \beta^{-1} \ln(1 + e^{-\beta\omega_m}) + \sum_n \beta^{-1} \ln(1 + e^{-\beta\zeta_n}) \right), \quad (3.14f)$$

wobei L die Dimension der Hüpfmatrix darstellt und die Spin-Summation bei Erhaltung der S^z -Quantenzahl lediglich einen Faktor 2 liefert. In numerischen Rechnungen wird das Potential üblicherweise auf L normiert $\Omega \rightarrow \Omega/L$ angegeben.

Es existiert eine große Bandbreite an Methoden, deren Ziel die numerische Behandlung von Gittersystemen im thermodynamischen Limes unendlich großer Systeme und Teilchenzahl bei Erhaltung der Teilchendichte $N \rightarrow \infty$, $L \rightarrow \infty$, $N/L = \text{const.}$ ist. Im Folgenden geben wir einen kurzen Überblick über einige Methoden, die aus der SFT abgeleitet werden können. Danach erklären wir, welche Vereinfachungen für die in dieser Arbeit verwendete Methode gemacht werden können und gehen auf die numerische Implementierung ein. Außerdem wird in diesem Zusammenhang auf analytisch handhabbare Spezialfälle hingewiesen.

3.2.1 Quanten-Cluster-Methoden

Es existieren verschiedene Methoden zur Untersuchung wechselwirkender Gittersysteme, die sich in der Art der Wahl des Referenzsystems unterscheiden. Die sogenannte „Cluster

Perturbation Theory“ (CPT) [52] teilt das Ursprungssystem, ab sofort nur Gitter oder Gittersystem genannt, vollständig in nicht-überlappende Untergitter auf, löst ein Untergitter, z. B. mit einer Quanten-Monte-Carlo Methode, dem Lanczos-Algorithmus oder durch Exakte Diagonalisierung (ED), und behandelt die Kopplung zwischen diesen als Störung. Sie kann im Rahmen der SFT zu einer thermodynamisch konsistenten Methode,

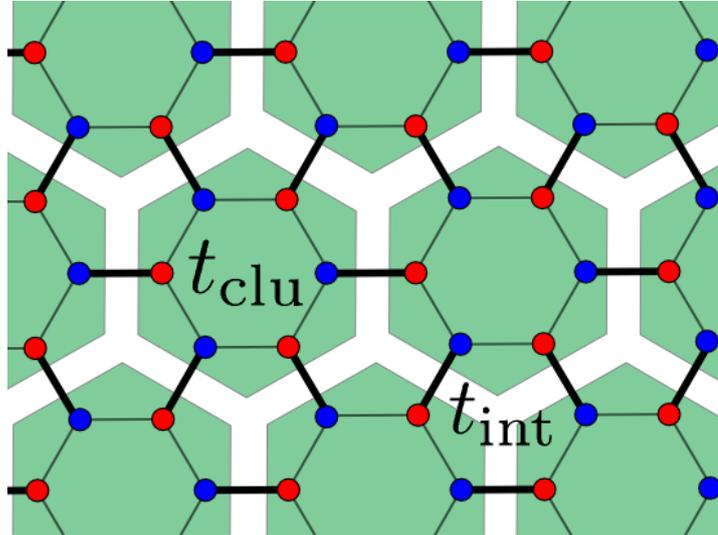


Abbildung 3.4: CPT als naive, nicht selbst-konsistente Quanten-Cluster-Methode, erfasst Korrelationen innerhalb des Clusters, hier mit einer einzelnen Bienenwabe. Intercluster-Hopping t_{int} (fett) wird als Störparameter behandelt, der Cluster mit t_{clu} exakt gelöst.

zum sogenannten „Variational Cluster Approach“ (VCA) erweitert werden [52], indem das großkanonische Potential bezüglich der Ein-Teilchen-Parameter optimiert wird. Dabei werden dem Referenzsystem üblicherweise auch weitere unkorrelierte Badplätze hinzugefügt. Durch geeignete Wahl des Referenzsystems kann auch langreichweitige Ordnung im Rahmen der SFT beschrieben werden. Der Mechanismus der spontanen Symmetriebrechung findet sich auf natürliche Weise in der SFT wieder. Fiktive Hilfsfelder, im Falle von (anti-)ferromagnetischer Ordnung Weiss-Felder genannt, können Teil des Referenzsystems sein. Sie können im Potential-Optimum endliche Feldstärken annehmen, obwohl kein physikalisches Magnetfeld angelegt ist. Der antiferromagnetische Grundzustand des Hubbard-Modells auf dem Quadratgitter kann zum Beispiel so gefunden werden [52]. Die Ein-Teilchen-Parameter des Systems und des Hilfsfeldes werden optimiert, sodass Gl. (3.11) erfüllt und das großkanonische Potential stationär ist.

Eine weitere Methode erweitert die dynamischen Molekularfeld-Theorie (DMFT) im Rahmen der SFT und firmiert unter dem Namen „Cellular DMFT“ oder CDMFT [52]. Hier wird die Selbstenergie als lokal angenommen und durch Ankopplung eines SIAMs an jeden Gitterplatz eines endlichen Subsystems numerisch exakt oder in diagrammati-

scher Störungstheorie selbstkonsistent berechnet. In dieser Arbeit wird die „Dynamical Impurity Approximation“ (DIA) und damit ein SIAM zur Wahl des Referenzsystems verwendet. Wir koppeln eine endliche Anzahl an unkorrelierten Badplätzen n_b an jeden Gitterplatz an und lösen dieses Referenzsystem durch exakte Diagonalisierung. Es handelt sich bei der DIA um eine Verallgemeinerung der DMFT, die im Grenzfall unendlich vieler Badplätze $n_b \rightarrow \infty$ reproduziert wird. Abbildung 3.5 zeigt die zusätzlichen Badplätze auf einer Plakette des Bienenwabengitters. Das Referenzsystem wird von den disjunkten SIAMs an jedem Gitterplatz gebildet. Die DIA zeigt in Ref. [50] schon für Referenzsysteme mit zwei bis vier Plätzen vielversprechende Ergebnisse zur Bestimmung kontinuierlicher Phasenübergänge mit relativ geringem numerischen Aufwand.

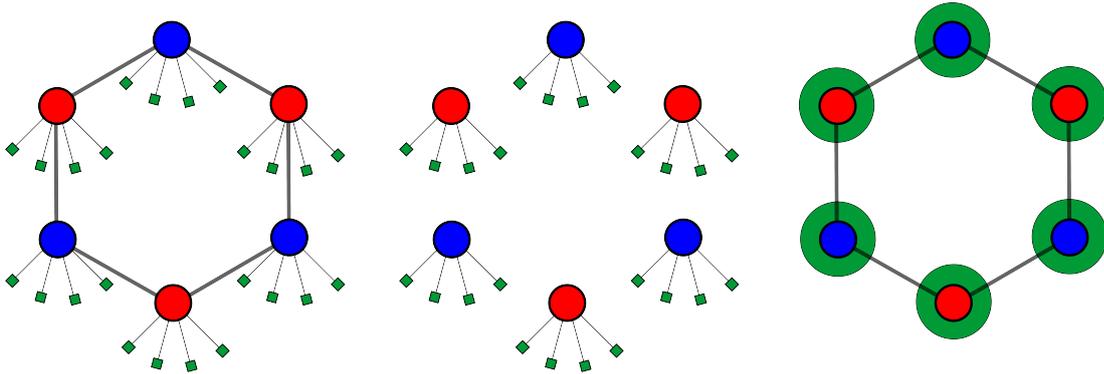


Abbildung 3.5: Vier zusätzliche Badplätze werden an die ursprünglichen Gitterplätze angekoppelt. *Links:* Plakette des Bienenwabengitters mit Badplätzen an jedem Gitterplatz, *Mitte:* Periodisch angeordnete disjunkte SIAMs bilden das Referenzsystem *Rechts:* Schematische Darstellung unendlich vieler Badplätze im Grenzfall der DMFT.

Zunächst wurde die DIA von Potthoff zur Beschreibung des Mott-Hubbard-Phasenübergangs [40] verwendet. Sie wird in dieser Arbeit im Rahmen der SFT benutzt, um eine topologisch nicht-triviale Phase des Haldane-Modells durch Einbettung von Wechselwirkungseffekten bei Temperatur $T = 0$ in eine triviale Isolatorphase zu überführen. Wir suchen also einen topologischen Quantenphasenübergang. Dazu verwenden wir lokale Näherungen, um die auftretenden Integrationen numerisch durchführen zu können. Dabei erweitern wir die von Potthoff beschriebene Näherung auf die Einheitszelle des Bienenwabengitters mit zwei Plätzen.

3.2.2 Lokale Näherungen

Die Qualität einer Näherungsmethode mit lokaler Selbstenergie $\Sigma_{ij}(\omega) = \delta_{ij}\Sigma(\omega)$ hängt von der Anzahl der übrigen Freiheitsgrade, d.h. der angekoppelten Badplätze ab, die im Fall der DMFT maximal $n_b \rightarrow \infty$ wird. Die DMFT beschreibt so dynamische Korrelationen in lokaler Näherung und lässt so räumliche Korrelationen unbeachtet. Auch für eine endliche Anzahl an Badplätzen liefern lokale Näherungen brauchbare

Ergebnisse. Gleichung (3.14d) kann für eine lokale Selbstenergie weiter ausgewertet werden und auf ein eindimensionales Integral zurückgeführt werden

$$\begin{aligned} & \text{Tr} \left(\ln \left(- \left(G_0^{-1}(\mathbf{t}) - \Sigma(\mathbf{t}) \right)^{-1} \right) \right) \\ &= - \sum_{k\sigma} \int d\omega f(\omega) \Theta(\omega + \mu - \epsilon(k) - \Sigma(\omega)) \end{aligned} \quad (3.15a)$$

$$= -2L \int d\omega f(\omega) \int dz \rho_0(z) \Theta(\omega + \mu - z - \Sigma(\omega)) \quad (3.15b)$$

$$= 2L \int d\omega f(\omega) \int dz R_0(z) \frac{d}{dz} \Theta(\omega + \mu - z - \Sigma(\omega)) \quad (3.15c)$$

$$= -2L \int d\omega f(\omega) R_0(\omega + \mu - \Sigma(\omega)) \quad (3.15d)$$

$$\text{mit } R_0(z) = \int_{-\infty}^z dz' \rho_0(z') \quad \text{und} \quad \rho_0(z) = L^{-1} \sum_k \delta(z - \epsilon(k)), \quad (3.15e)$$

wobei $\epsilon(k)$ die Dispersion im Impulsraum und $f(\omega)$ die Fermi-Funktion darstellt [40]. Letztere reduziert sich im für diese Arbeit relevanten Fall verschwindender Temperatur $\beta \rightarrow \infty$ und halber Teilchenfüllung $\mu = 0$ auf eine Heaviside-Funktion.

Im Falle einer Einheitszelle mit mehr als einem Gitterplatz, wie beim Bienenwaben-gitter mit verschiedenen Ein-Teilchen-Parametern in den beiden SIAMs an den Plätzen A und B , kann der Hamilton-Operator durch Fouriertransformation lediglich blockdiagonalisiert werden

$$\tilde{H}_0(k) = \sum_{\sigma, k \in \text{RBZ}} \xi_k \left(c_{k,A,\sigma}^\dagger c_{k,B,\sigma} + \text{h.c.} \right) + \left(D_k c_{k,A,\sigma}^\dagger c_{k,A,\sigma} + \tilde{D}_k c_{k,B,\sigma}^\dagger c_{k,B,\sigma} \right) \quad (3.16a)$$

$$= \begin{pmatrix} c_{k,A,\sigma}^\dagger & c_{k,B,\sigma}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D_k & \xi_k \\ \xi_k^* & \tilde{D}_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{k,A,\sigma} \\ c_{k,B,\sigma} \end{pmatrix}. \quad (3.16b)$$

Damit erhält auch die Green-Funktion eine 2×2 -Matrixstruktur, in der Wechselwirkungseffekte durch die lokalen Selbstenergien über die Diagonalelemente $\bar{\omega}_{A/B} = \omega - \Sigma_{A/B}(\omega)$ eingehen. Für den Fall, dass nur das Nächst-Nachbar-Hüpfen betrachtet wird, verschwinden in Gl. (3.16b) die Diagonalelemente der Hamilton-Matrix. Die lokale Green-Funktion kann dann nach Invertierung der Hamilton-Matrix aus den Diagonalelementen der Green-Funktion im Impulsraum bestimmt werden, wie Pruschke et. al. [53] gezeigt haben

und durch die freie Zustandsdichte $\rho_0(x) = \frac{1}{N} \sum_k \delta(x - \xi_k)$ mit reellem ξ_k ausgedrückt werden:

$$G_k(\omega) = (\omega - \tilde{H}_0(k))^{-1} = \frac{1}{\bar{\omega}_A \bar{\omega}_B - \xi_k^2} \begin{pmatrix} \bar{\omega}_B & -\xi_k \\ -\xi_k & \bar{\omega}_A \end{pmatrix} \quad (3.17a)$$

$$G_{\text{loc}}^{A/B}(\omega) = \sum_{k,i} (G_k(\omega))_{ii} = \bar{\omega}_{B/A} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\rho_0(x)}{\bar{\omega}_A \bar{\omega}_B - x^2} \quad (3.17b)$$

$$= \frac{\bar{\omega}_{B/A}}{2\sqrt{\bar{\omega}_A \bar{\omega}_B}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\frac{\rho_0(x)}{\sqrt{\bar{\omega}_A \bar{\omega}_B} - x} + \frac{\rho_0(x)}{\sqrt{\bar{\omega}_A \bar{\omega}_B} + x} \right] \quad (3.17c)$$

$$= \bar{\omega}_{B/A} \frac{G_0(\sqrt{\bar{\omega}_A \bar{\omega}_B}) - G_0(-\sqrt{\bar{\omega}_A \bar{\omega}_B})}{2\sqrt{\bar{\omega}_A \bar{\omega}_B}} \quad (3.17d)$$

Die freie Zustandsdichte erlaubt im letzten Schritt die lokale wechselwirkende Green-Funktion durch die freie Green-Funktionen mit modifizierten Frequenz-Argumenten zu formulieren.

Ein Massenterm $M > 0$ oder Übernächst-Nachbar-Hüpfen $t_2 > 0$ im Haldane-Hamilton-Operator (2.8) verursacht endliche Diagonalbeiträge D_k und \tilde{D}_k der Hamilton-Matrix. Eine weitere Symmetrie $\tilde{D}_k = -D_k$ gilt, wenn die komplexe Phase den Wert $\phi = \pi/2$ annimmt. Ohne Masse $M = 0$ legt ein reelles Übernächst-Nachbar-Hüpfen $t_2 > 0$, $\phi = 0$ die Diagonalbeiträge auf $D_k = \tilde{D}_k$ fest. Die genauen algebraischen Ausdrücke für D_k sind Appendix A.2 zu entnehmen. Für die lokalen Green-Funktionen finden wir in diesen beiden Fällen

$$G_{\text{loc}}^{A/B}(\omega) \stackrel{\phi=\pi/2}{=} \sum_k \frac{\bar{\omega}_{B/A} \pm D_k}{(\bar{\omega}_A - D_k)(\bar{\omega}_B + D_k) - |\xi_k|^2} \quad (3.18a)$$

$$G_{\text{loc}}^{A/B}(\omega) \stackrel{\phi=M=0}{=} \sum_k \frac{\bar{\omega}_{B/A} - D_k}{(\bar{\omega}_A - D_k)(\bar{\omega}_B - D_k) - |\xi_k|^2}. \quad (3.18b)$$

Die Untergitterstruktur schlägt sich auch in den lokalen Zustandsdichten nieder. Sie werden gemäß Gleichung (2.11) aus den lokalen Green-Funktionen bestimmt. Dazu ist meist eine numerische Auswertung von Funktionen der Form

$$\rho^{A/B}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_k G_{\text{loc}}^{A/B}(\omega) = \sum_{k,i} \frac{\alpha(k, \omega_i)}{\partial_\omega \beta(k, \omega_i)} \delta(\omega - \omega_i(k)), \quad (3.19a)$$

mit ω_i den Nullstellen von $\beta(k, \omega)$, nötig. Details der Rechnung und die genaue Form der Zustandsdichten finden sich in Appendix A.2. Für verschwindende Diagonalelemente $D_k = 0$, $\forall k$ kann anknüpfend an Gl. (3.17d) die Zustandsdichte aus $G_{\text{loc}}^{A/B}(\omega)$ ermittelt werden. Der Formulierung nach Gl. (2.13) folgend, wird der Imaginärteil der Green-Funktion gebildet. Dabei ist die kausale Struktur der Green-Funktionen, d. h. die Position ihrer Pole, und ihre analytische Struktur zu beachten. Man findet

$$\rho_U^{A/B}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left(G_{\text{loc}}^{A/B}(\omega) \right) \quad (3.20)$$

$$= \text{Re} \left(\sqrt{\frac{\bar{\omega}_{B/A}}{\bar{\omega}_{A/B}}} \right) \rho_0(\sqrt{\bar{\omega}_A \bar{\omega}_B}) - \frac{1}{\pi} \text{Im} \left(\sqrt{\frac{\bar{\omega}_{B/A}}{\bar{\omega}_{A/B}}} \right) \text{Re} \left(G_0(\sqrt{\bar{\omega}_A \bar{\omega}_B}) \right) \quad (3.21)$$

und die Positivität und Norm der Zustandsdichte bleiben erhalten. Die Symmetrie bezüglich ω wird allerdings gebrochen, sodass allgemein im Fall einer bipartiten Untergitterstruktur bei halber Teilchenfüllung $\rho_U^{A/B}(\omega) = \rho_U^{B/A}(-\omega)$ gilt. Zur Berechnung des Gitterbeitrags zum großkanonischen Potential Gl. (3.10) wird dann Gl. (3.14d) verwendet mit den Eigenwerten $g_k(\omega)$ von $G_k(\omega)$, wobei bei der numerischen Auswertung auf korrekte Normierung von Summen im Impulsraum zu achten ist.

Der Potentialbeitrag des Referenzsystems, der sich aus seiner freien Green-Funktion $G'_0(\mathbf{t}')$ und Selbstenergie $\Sigma(\mathbf{t}')$ in Abhängigkeit der Ein-Teilchen-Parameter \mathbf{t}' ergibt, kann ebenfalls mit Hilfe der Green-Funktionen weitervereinfacht werden zu

$$\begin{aligned} & \text{Tr} \left(\ln \left(- \left(G_0'^{-1}(\mathbf{t}') - \Sigma(\mathbf{t}') \right)^{-1} \right) \right) \\ &= 2L \int_{-\infty}^{\infty} d\omega f(\omega) \left(\Theta(G'_0(\omega)) + \sum_{i=1}^{n_b} \Theta(G'_i(\omega)) \right) \end{aligned} \quad (3.22a)$$

$$= 2L \int_{-\infty}^{\infty} d\omega f(\omega) \left(\Theta(\omega + \mu - \varepsilon_0 - \Delta(\omega) - \Sigma(\omega)) + \sum_{i=1}^{n_b} \Theta(\omega + \mu - \varepsilon_i) \right) \quad (3.22b)$$

mit der Hybridisierungsfunktion $\Delta(\omega) = \sum_{i=1}^{n_b} \frac{V_i^2}{\omega + \mu - \varepsilon_i}$ und der Fall nicht-trivialer Struktur der Einheitszelle schlägt sich hier aufgrund der Extensivität des großkanonischen Potentials lediglich als Summation über die Green-Funktionen aller Cluster bei entsprechender Normierung nieder. Auf die numerische Berechnung dieser Größen wird im folgenden Abschnitt näher eingegangen.

3.2.3 Berechnung des großkanonischen Potentials

In der numerischen Berechnung des großkanonischen Potentials beschränken wir uns ab sofort wieder auf den Spezialfall verschwindender Temperatur $\beta \rightarrow \infty$ und halber Teilchenfüllung $\mu = 0$ also im Mittel einem Elektron pro Platz. Das großkanonische Potential Ω , dessen stationäre Punkte zu den physikalischen Ein-Teilchen-Parametern korrespondieren, setzt sich aus den Beiträgen von Gitter und angekoppeltem Cluster zusammen. Ausgehend von Gl. (3.10) zerlegen wir Ω in die Beiträge

$$\Omega_t[\Sigma] = \Omega' + \Omega_{\text{lat}} - \Omega_{\text{clu}} \quad (3.23a)$$

$$\Omega' = E'_0 - \mu \langle N \rangle \quad (3.23b)$$

$$\Omega_{\text{lat}} = \text{Tr} \left[\ln \left(- \left(G_0^{-1} - \Sigma \right) \right) \right] \quad (3.23c)$$

$$\Omega_{\text{clu}} = \text{Tr} \left[\ln \left(- \left(G_0'^{-1} - \Sigma \right) \right) \right]. \quad (3.23d)$$

Letzterer Ausdruck inkorporiert hier die Näherung, die im Cluster bestimmte lokale Selbstenergie auch für das translationsinvariante Gittersystem anzunehmen, die durch den gemeinsamen Wechselwirkungsanteil U der Subsysteme motiviert ist. Die Berechnung dieser Beiträge ist im Matsubara-Frequenz-Formalismus möglich und kann im hier betrachteten Fall einer lokalen Selbstenergie insbesondere bei $T = 0$ auf ein eindimensionales Integral zurückgeführt werden, dessen numerische Berechnung für den Fall einer

Einheitszelle mit gleich gewichteten Plätzen A und B möglich ist. Der Gitteranteil des großkanonischen Potentials

$$\Omega_{\text{lat}}^{\text{loc}} = -2L \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \Theta(\mu - \omega) R_0(\omega + \mu - \Sigma(\omega)) \quad (3.24a)$$

$$R_0(E) = \int_{-\infty}^E d\epsilon \rho_0(\epsilon) \quad (3.24b)$$

enthält neben der Fermi-Funktion, die sich bei $T = 0$ auf eine Heaviside-Funktion $\Theta(\mu - \omega)$ reduziert, die freie Zustandsdichte $\rho_0(\epsilon)$ des Gittersystems. Die Diskretisierung des Integrals als Riemannsumme im Computer erfolgt wie gewohnt als

$$\Rightarrow \Omega_{\text{lat}}^{\text{loc}} \approx -2L\Delta\omega \sum_{\omega=-\Lambda}^0 R_0(\omega + \mu - \Sigma(\omega)) \quad (3.25)$$

mit einer Cutoff-Frequenz Λ , die den Modellparametern angepasst wird, sodass eventuell auftretende Polstrukturen stets eingeschlossen werden. Die im Allgemeinen beliebig komplizierte Pol- und Nullstellen-Struktur der Selbstenergie erlaubt keine Interpolation des Integranden, z. B. mit der Simpson-Regel. Im Falle einer semi-elliptischen Zustandsdichte

$$\rho_0^{\text{SE}}(\epsilon, t) = \frac{1}{\pi t} \sqrt{1 - \left(\frac{\epsilon}{2t}\right)^2} \quad (3.26)$$

wird

$$R_0(E, t) = \int_{-\infty}^E d\epsilon \rho_0^{\text{SE}}(\epsilon, t) \quad (3.27a)$$

$$= \int_{-2t}^E d\epsilon \frac{1}{\pi t} \sqrt{1 - \left(\frac{\epsilon}{2t}\right)^2} \quad (3.27b)$$

$$= \frac{1}{\pi} \left[\frac{E}{2} \sqrt{1 - \left(\frac{E}{2t}\right)^2} + \arcsin\left(\frac{E}{2t}\right) \right] + \frac{1}{2t} \quad (3.27c)$$

analytisch bestimmt. Hierbei ist zu beachten, dass die Zustandsdichte $\rho_0^{\text{SE}}(\epsilon, t)$ für $|\epsilon| > 2t$ identisch Null ist und die Berechnung von $R_0(E, t)$ auf dieses Intervall reduziert werden kann. Für $\epsilon > 2t$ ($\epsilon < -2t$) ist $R_0(E, t)$ identisch Eins (Null). Wird eine Einheitszelle mit zwei verschiedenen gewichteten Plätzen A und B betrachtet, wie im Fall einer Haldane-Masse oder einer komplexen Übernächst-Nachbar-Amplitude, verwenden wir zur Berechnung des Gitterbeitrags Gleichung (3.14d) mit den Eigenwerten der lokalen Green-Funktionen gemäß Gl. (A.5b) bzw. (A.6d), was einer Mittelung über beide Plätze entspricht, und der bereits beschriebenen Integraldiskretisierung.

Der Beitrag des Clusters zum großkanonischen Potential kann ebenfalls unter Ausnutzung der bekannten Green-Funktionen (2.15) und (2.16a) numerisch bestimmt werden

$$\Omega_{\text{clu}}^{\text{loc}} = -2L \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \Theta(\mu - \omega) \sum_{i=0}^{N_c} \Theta(G'_i(\omega)) \quad (3.28a)$$

$$\Rightarrow \Omega_{\text{clu}}^{\text{loc}} \approx -2L\Delta\omega \sum_{\omega=-\Lambda}^0 \sum_{i=0}^{N_c} \Theta(G'_i(\omega)), \quad (3.28b)$$

wobei die über die lokalen Green-Funktionen $G'_i(\omega)$ jedes Cluster-Platzes summiert wird. Die Integration reduziert sich zu einer Summe über Heaviside-Funktionen mit kompaktem Träger, sodass deren Beiträge durch Lokalisierung von nicht verschwindenden Funktionswerten gefunden werden können.

$$\Omega_{\text{clu}}^{\text{loc}} = -2L \int_{-\infty}^0 d\omega \Theta\left(\omega + \mu - \varepsilon_0 - \Sigma(\omega) - \sum_{i=1}^{N_c} \frac{V_i^2}{\omega + \mu - \varepsilon_i}\right) + \sum_{i=1}^{N_c} \Theta(\omega + \mu - \varepsilon_i) \quad (3.28c)$$

$$\Rightarrow \frac{\Omega_{\text{clu}}^{\text{loc}}}{-2L} \approx \Delta\omega \sum_{\omega=-\Lambda}^0 \left(\Theta\left(\omega + \mu - \varepsilon_0 - \Sigma(\omega) - \sum_{i=1}^{N_c} \frac{V_i^2}{\omega + \mu - \varepsilon_i}\right) + \sum_{i=1}^{N_c} \Theta(\omega + \mu - \varepsilon_i) \right) \quad (3.28d)$$

Um also die Beiträge zum Integral zu erhalten, können in jedem Frequenzpunkt die Ungleichungen

$$\omega + \mu - \varepsilon_0 - \Sigma(\omega) - \sum_{i=1}^{N_c} \frac{V_i^2}{\omega + \mu - \varepsilon_i} \geq 0 \Leftrightarrow \Sigma(\omega) \leq \omega + \mu - \varepsilon_0 - \sum_{i=1}^{N_c} \frac{V_i^2}{\omega + \mu - \varepsilon_i} \quad (3.29)$$

$$\omega \geq \varepsilon_0 - \mu + \Sigma(\omega) + \sum_{i=1}^{N_c} \frac{V_i^2}{\omega + \mu - \varepsilon_i} \quad \text{und} \quad \omega \geq \varepsilon_{i \neq 0} - \mu \quad (3.30)$$

ausgewertet werden, um die Beiträge der Heaviside-Funktionen zum Integralwert zu lokalisieren. Der Wert des Integrals ergibt sich schließlich durch Summation der Rechtecke mit Höhe Eins, deren Anfang und Ende durch den Gleichheitsfall in Gl. (3.30) terminiert sind. Zur numerischen Bestimmung wird überprüft, ob sich der Wahrheitswert einer der Gln. (3.30) von einem Frequenzschritt zum nächsten ändert. Ist dies der Fall wird jene Frequenz ω^* gespeichert und als Rechteckkante interpretiert. Nachdem alle Frequenzen $\omega \in (-\Lambda, 0)$ überprüft wurden, wird die Summe der Differenzen $\sum_{i=0} (\omega_{2i+1}^* - \omega_{2i}^*)$ zurückgegeben. Während die Terme ohne Selbstenergiebeiträge in Gl. 3.30 gut handhabbar sind, verhindern die zahlreichen und unregelmäßig auftretenden Pole und Nullstellen der Selbstenergie eine zuverlässige Nullstellensuche zur besseren numerischen Berechnung der Integrale (3.24b) und (3.28a).

3.2.4 DIA mit einem Badplatz

Der Spezialfall eines einzelnen unkorrelierten Badplatzes $n_s = 2$ erlaubt teilweise die analytische Berechnung der Selbstenergie. Dieses Referenzsystem ist z. B. gegenüber DMFT oder DIA mit $n_s > 2$ als unterlegen einzustufen, liefert aber trotz seiner Einfachheit bereits brauchbare Ergebnisse. Außerdem eignet es sich als Test der numerischen Implementierung. Im Fall $\varepsilon_c = \varepsilon_a = \mu = 0$ sind die vier Pole der Green-Funktion und die exakte Selbstenergie für $n_s = 2$ -DIA bekannt [40] und lauten

$$\Sigma(\omega) = \frac{U^2}{8} \left(\frac{1}{\omega - 3V} + \frac{1}{\omega + 3V} \right) \quad (3.31)$$

$$\omega_m^* = \pm \frac{1}{4} \left(\sqrt{U^2 + 64V^2} \pm \sqrt{U^2 + 16V^2} \right). \quad (3.32)$$

Die Green-Funktion $G'_{i,\sigma}(\omega)$ lässt sich in der Basis der Spin-Besetzungszahlen außerdem für den Spezialfall verschwindender Hybridisierung $V = 0$ in Lehmanndarstellung Gl. (2.10c) angeben. Der Hilbertraum des Systems aus zwei Plätzen ist $\mathcal{H}_2 = \mathcal{H}_1^c \otimes \mathcal{H}_1^a$ mit den Hilberträumen des Zentral- bzw. Badplatzes mit ihren jeweiligen Basiszuständen $\{|0\rangle^{a/c}, |\uparrow\rangle^{a/c}, |\downarrow\rangle^{a/c}, |\uparrow\downarrow\rangle^{a/c}\}$ eines leeren, einfach oder doppelt besetzten Platzes. Die Basiszustände von \mathcal{H}_2 sind $\{|\psi\rangle_2\} = \{|\phi\rangle^c \otimes |\chi\rangle^a\} \equiv \{|\phi, \chi\rangle\}$ mit allen Kombinationen $\{\phi, \chi\} \in \{0, \uparrow, \downarrow, \uparrow\downarrow\}$. Da das System bei Halbfüllung betrachtet wird, lässt sich der Hilbertraum auf einen relevanten Unterraum reduzieren. Der relevante Spin-Unterraum ist derjenige mit Gesamtspin $S^z = 0$ bei halber Füllung für den Grundzustand, da nur hier aufgrund des Pauli-Verbots eine Dynamik stattfinden kann. Außerdem werden Zustände im $S^z = 1/2$ -Unterraum durch die Anwendung von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren erreicht. Der Hamilton-Operator besitzt in dieser Basis und den entsprechenden Unterräumen die Matrix-Darstellung

$$H|_{N=2, S^z=0} = \begin{pmatrix} 2\varepsilon_c + U/2 & V & -V & 0 \\ V & \varepsilon_c + \varepsilon_a & 0 & V \\ -V & 0 & \varepsilon_c + \varepsilon_a & -V \\ 0 & V & -V & 2\varepsilon_a \end{pmatrix} \quad (3.33)$$

$$H|_{S^z=1/2} = \begin{pmatrix} \varepsilon_c & 0 & V & 0 \\ 0 & \varepsilon_c & 0 & V \\ V & 0 & \varepsilon_a & 0 \\ 0 & V & 0 & \varepsilon_a \end{pmatrix}. \quad (3.34)$$

Damit lassen sich die Diagonalelemente der Green-Funktion

$$G'_{00,\uparrow}(\omega) = \sum_{i=0,1} \frac{\langle \uparrow\downarrow, 0 | c_{0\uparrow}^\dagger | \downarrow, 0 \rangle \langle \downarrow, 0 | c_{0\uparrow} | \uparrow\downarrow, 0 \rangle}{\omega + (-1)^i (E_{\uparrow\downarrow,0} - E_{\downarrow,0})} + \frac{\langle \uparrow, \downarrow | c_{0\uparrow}^\dagger | 0, \downarrow \rangle \langle 0, \downarrow | c_{0\uparrow} | \uparrow, \downarrow \rangle}{\omega + (-1)^i (E_{\uparrow,\downarrow} - E_{0,\downarrow})} \quad (3.35a)$$

$$= \frac{1}{\omega + \varepsilon_c + U/2} + \frac{1}{\omega - \varepsilon_c - U/2} + \frac{1}{\omega + \varepsilon_c} + \frac{1}{\omega - \varepsilon_c} \quad (3.35b)$$

$$= \frac{1}{\omega + U/2} + \frac{1}{\omega - U/2} + \frac{2}{\omega} \quad \text{mit } \varepsilon_c = 0 \quad (3.35c)$$

$$G'_{11,\uparrow}(\omega) = \sum_{i=0,1} \frac{\langle \downarrow, \uparrow | c_{1\uparrow}^\dagger | \downarrow, 0 \rangle \langle \downarrow, 0 | c_{1\uparrow} | \downarrow, \uparrow \rangle}{\omega + (-1)^i (E_{\downarrow,\uparrow} - E_{\downarrow,0})} + \frac{\langle 0, \uparrow \downarrow | c_{1\uparrow}^\dagger | 0, \downarrow \rangle \langle 0, \downarrow | c_{1\uparrow} | 0, \uparrow \downarrow \rangle}{\omega + (-1)^i (E_{0,\uparrow\downarrow} - E_{0,\downarrow})} \quad (3.36a)$$

$$= \frac{2}{\omega + \varepsilon_a} + \frac{2}{\omega - \varepsilon_a} = \frac{4}{\omega} \quad \text{mit } \varepsilon_a = 0 \quad (3.36b)$$

bei halber Füllung angeben. Die Darstellung durch den Anti-Kommutator der fermionischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren in Gl. (2.10a) verdeutlicht die physikalische Bedeutung der Ein-Teilchen-Green-Funktion $G'_{ij,\sigma}(\omega)$ als Propagator, der zwischen Platz i und j vermittelt. Mit $V = 0$ findet keine Teilchen-Propagation zwischen den beiden Cluster-Plätzen statt und die Nebendiagonalelemente G_{01} und G_{10} verschwinden. Die Spinausrichtungen $G'_{ii,\sigma} = G'_{ii,-\sigma}$ unterscheiden sich nicht.

Zur Lösung des Referenzsystems in einem Parameter-Regime, das nicht mehr analytisch zugänglich ist, wird in dieser Arbeit die Methode der exakten Diagonalisierung verwendet, auf die nun kurz eingegangen wird.

3.3 Exakte Diagonalisierung

Die Grundidee der hier verwendeten DIA ist, wie alle aus der Selbstenergiefunktional-Theorie abgeleiteten Näherungen, den Wechselwirkungsanteil des Gitter-Hamilton-Operators in einem Referenzsystem zu inkorporieren, dieses exakt zu lösen und das Resultat in Beziehung zum ursprünglichen Gesamtproblem zu stellen, da jenes inklusive Wechselwirkung aufgrund hoher Komplexität weder analytisch noch numerisch zugänglich ist. Hier wird als Referenzsystem ein Störstellenmodell nach Anderson (SIAM) verwendet, das die Selbstenergie als lokal, also impulsunabhängig, annähert und schon für wenige Badplätze n_b gute Ergebnisse liefert. Das Referenzsystem aus 4^{1+n_b} Zuständen kann dann als Eigenwertproblem $H' |n\rangle = E'_n |n\rangle$ numerisch in C++ mit der „Eigen“-Bibliothek diagonalisiert werden. Zur Berechnung der retardierten Green-Funktion wird ihre Lehmann-Darstellung im Falle verschwindender Temperatur benutzt

$$G_{ij}(\omega) = \sum_n \frac{\langle n | c_j | 0 \rangle \langle 0 | c_i^\dagger | n \rangle}{\omega + E_n - E_0 + i\eta} + \frac{\langle 0 | c_j | n \rangle \langle n | c_i^\dagger | 0 \rangle}{\omega - E_n + E_0 + i\eta} \quad (3.37)$$

mit endlichem $\eta = 10^{-8}$. Die Selbstenergie $\Sigma_{ij}(\omega)$ wird gemäß der Dyson-Gleichung (2.12) mit der `invert()`-Routine der „Eigen“-Bibliothek bestimmt. Die physikalische Selbstenergie an einem Sattelpunkt von Gl. (3.10) modifiziert das Eigensystem des topologischen Hamilton-Operators (2.17a). Seine Chern-Zahl kann numerisch mit Hilfe einer grob diskretisierten Brillouin-Zone berechnet werden, worauf wir im Folgenden noch im Detail eingehen werden. Vorher wollen wir noch auf die numerische Berechnung von (lokalen) Zustandsdichten eingehen, da diese über die Hilbert-Darstellung (2.10a) bzw. die Identität (2.11) direkt mit der Green-Funktion verknüpft sind.

3.4 Numerische Bestimmung von Zustandsdichten

Die Zustandsdichte des Gittersystems stellt eine Größe von zentraler Bedeutung für die SFT dar, da sie und die mit ihr assoziierten Green-Funktionen den Potentialbeitrag des Gitters Ω_{lat} maßgeblich bestimmen. Dazu ist eine möglichst exakte numerische Auswertung der Zustandsdichte in Anwesenheit von Wechselwirkung aber auch im Fall einer A/B -Untergitterstruktur gewünscht. Wir verwenden je nach Anwendung verschiedene Methoden zur Berechnung und Visualisierung der Zustandsdichte. Eine Möglichkeit geht von der lokalen Green-Funktion aus und berechnet ihren Imaginärteil gemäß Gl. (2.11) mit einem endlichen Imaginärteil des Nenners. Für die numerische Auswertung des auftretenden Integrals kann das Integrationsintervall auf den (kompakten) Träger der Zustandsdichte eingeschränkt werden. Auf die Erhaltung der Norm der Zustandsdichte muss bei dieser Art der Berechnung aus numerischen Gründen besonders geachtet werden.

Eine weitere Möglichkeit liegt in der numerischen Bestimmung von Ausdrücken der Form

$$\rho(\omega) = \sum_{k=-\pi}^{\pi} A_k \delta(\omega - B_k), \quad (3.38)$$

die typischerweise in den in dieser Arbeit behandelten Problemen auftritt (siehe dazu die Ableitung von (A.10)). Dazu wird im Computer für ein gegebenes B_k die Anzahl der Funktionswerte bestimmt, für die B_k in einem Intervall $[\omega - \Delta\omega, \omega + \Delta\omega]$ liegt. Diese Anzahl wird dann mit dem Gewicht A_k multipliziert. Für die k -Summe wird eine Diskretisierung in Schritten der Länge $2\pi/n_k$, wobei $n_k \in [150, 500]$ je nach Anwendung gewählt wird, verwendet. In Abhängigkeit der Gitterparameter ändert sich die Bandbreite W der Dispersion und die Größe der ggf. vorhandenen Bandlücke Δ . Dementsprechend sind auch die Intervallbreiten $\Delta\omega$ anzupassen. Sie liegen in der Größenordnung von $\Delta\omega^{-1} \approx 100W$.

3.5 Chern-Zahlen nach Fukui

Eine direkte numerische Berechnung der Chern-Zahl nach Gl. (2.3) ist nicht ohne Weiteres möglich, da der Ausdruck Ableitungen nach den Eigenvektoren enthält. Diese sind nur bis auf eine im Allgemeinen beliebige $U(1)$ -Phase definiert und daher im Computer nicht konsistent berechenbar. Geschickte Umformung zu Gl. (2.6b) überführt jene Ableitungen in eine Ableitung des Hamiltonoperators deren Auswertung zwar im Computer möglich ist, jedoch mühsam und ungenau sein kann. Fukui et al. [54] propagieren stattdessen einen effizienten Ansatz zur Bestimmung von Chern-Zahlen ausgehend von einer sogenannten $U(1)$ -Linkvariablen

$$U_i^n(k_l) = \frac{\langle \psi_n(k_l) | \psi_n(k_l + \hat{e}_i) \rangle}{|\langle \psi_n(k_l) | \psi_n(k_l + \hat{e}_i) \rangle|}, \quad (3.39)$$

die den Überlapp der Wellenfunktionen des n -ten Bandes für kleine Translationen im k -Raum entlang der Einheitsvektoren \hat{e}_i misst. Im Falle zweier Raumdimensionen lässt sich dann die Berry-Feldstärke

$$F_{12}^n = \ln \left(\frac{U_1^n(k_l) U_2^n(k_l + \hat{e}_1)}{U_2^n(k_l) U_1^n(k_l + \hat{e}_2)} \right) \quad (3.40)$$

definieren, aus dem sich wie gewohnt die Chern-Zahl des n -ten Bandes

$$C_n = \frac{1}{2\pi i} \sum_l F_{12}^n(k_l) \quad (3.41)$$

als Summe der Feldstärke über die Brillouin-Zone ergibt. Diese Methode ist von der Form des zugrunde liegenden Hamilton-Operators unabhängig und wird daher zur Auswertung des topologischen Hamilton-Operators nach Gl. (2.17a) verwendet. Dabei reicht eine relativ grobe Diskretisierung bereits aus. Die kritische Anzahl an notwendigen Diskretisierungspunkten lässt sich abschätzen zu

$$N_c \approx \mathcal{O}(\sqrt{\text{Fläche der BZ} \times |C_n| / 2\pi^2}). \quad (3.42)$$

In dieser Arbeit wurde eine Diskretisierung von 100 Gitterpunkten in der zweidimensionalen Brillouin-Zone zur Bestimmung der Chern-Zahl verwendet. In diesem Kapitel wurden die Grundlagen der Selbstenergiefunktional-Theorie und ihre Anwendung auf topologische Systeme mit Wechselwirkung erläutert. Lokale Approximationen für gleichwertige Gitterplätze und die Einheitszelle des Bienenwabengitters wurden vollzogen und die numerische Implementierung dargelegt.

4 Resultate

In diesem Kapitel werden die erzielten Resultate präsentiert. Wir beginnen mit einer Diskussion der im Rahmen der DIA zu variierenden Ein-Teilchen-Parameter und reduzieren ihre Anzahl unter Verwendung von Teilchen-Loch-Symmetrie. Dann zeigen wir einige Potentiallandschaften für das Bienenwabengitter sowie auch mit einer semielliptischen Zustandsdichte. Einige typische Kurvenverläufe der Green-Funktionen und Selbstenergien, ihre Symmetrien und physikalischen Bedeutungen werden erläutert. Wir identifizieren den Mott-Übergang unter Betrachtung der wechselwirkenden Zustandsdichten für verschiedene topologische Regime des Haldane-Modells. Zum Schluss wird auf das großkanonische Potential für eine bipartite Untergitterstruktur eingegangen. Wir zeigen, dass ein Parameter-Regime des wechselwirkenden Haldane-Hubbard-Modells existiert, in dem die topologische Invariante – die Chern-Zahl des topologischen Hamilton-Operators – von Null verschiedene Werte annimmt.

4.1 Potentialminima und Selbstenergie

Im Rahmen der Selbstenergiefunktional-Theorie muss ein Variationsproblem gelöst werden, um stationäre Punkte des großkanonischen Potentials aufzufinden. Diese stationären Punkte korrespondieren zu Materiephasen, am absoluten Temperaturnullpunkt Quantenphasen genannt, die auch topologischer Natur sein können. Übergänge zwischen diesen Phasen, die durch die Form des großkanonischen Potentials und die Eigenschaften der stationären Punkte bestimmt werden, werden Quantenphasenübergänge genannt. Quantenphasenübergänge können durch Variation der Modell-Parameter getrieben werden. In unserem Fall sind das die Ein-Teilchen-Parameter des Haldane-Modells $\mathbf{t} = (t, t_2, \phi, M)$ und die Wechselwirkungsstärke U für zwei Elektronen mit verschiedener Spinorientierung auf dem gleichen Gitterplatz. Im Rahmen der DIA und SFT wird ein Anderson-Störstellen-Modell als Referenzsystem verwendet. Der Parameterraum des SIAMs besteht aus den Potentialen der Badplätze ε_i und des Zentralplatzes ε_0 sowie den Hybridisierungsstärken V_i zwischen Zentral- und Badplätzen. Das System wird bei halber Füllung $\mu = 0$ betrachtet. Im Mittel befindet sich also ein Elektron auf jedem Platz.

Das Auffinden stationärer Punkte stellt ein numerisch anspruchsvolles Problem dar und wird mit zunehmender Dimension des Parameterraums komplizierter. Abgesehen vom Fall eines einzelnen Parameters existieren keine garantiert konvergenten Algorithmen. Eine Reduzierung der Anzahl der relevanten Ein-Teilchen-Parameter ist also von großem Vorteil. In dieser Arbeit wurden die Fälle eines SIAM-Clusters mit $n_s = 2$ und $n_s = 4$ (kurz 2- bzw. 4-Cluster) betrachtet. Zunächst kann die Energie des Zentralplatzes ohne Beschränkung der Allgemeinheit auf $\varepsilon_0 = 0$ fixiert werden, da nur Energiedifferenzen

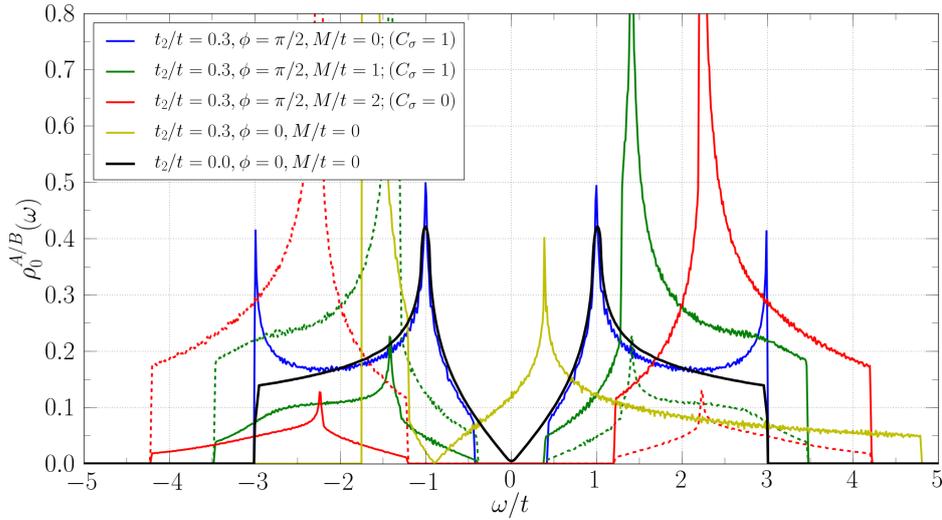


Abbildung 4.1: Zustandsdichten für verschiedene Parameter des Haldane-Modells. Übernächst-Nachbar-Hüpfen bricht für $\phi \neq \pm \pi/2$ die Teilchen-Loch-Symmetrie, wie an der asymmetrischen Kurve (gelb) zu sehen. In den Fällen mit $M > 0$ ist die Zustandsdichte des A -Untergitters in durchgezogenen, die des B -Untergitters in gestrichelten Linien dargestellt.

von physikalischer Bedeutung sind. Der Fall eines einzelnen zusätzlichen Badplatzes legt aufgrund der Teilchen-Loch-Symmetrie des Clusters auch seine Energie auf $\varepsilon_a \equiv \varepsilon_1 = \mu = 0$ fest, sodass die Hybridisierung $V \equiv V_1$ als einziger freier Parameter bleibt. Zur Bestimmung von Extrema des Potentials in Abhängigkeit von V wird ein modifizierter Regula-Falsi-Algorithmus verwendet [55, 56].

Die Erweiterung um zwei weitere Badplätze zum $n_s = 4$ -Fall erfordert zur Erhaltung der Teilchen-Loch-Symmetrie die symmetrische Wahl $\varepsilon_{2,3} = \mu \pm \varepsilon = \pm \varepsilon$ der Potentiale um das Fermi-Level und $V_2 = V_3$ zur gleichberechtigten Hybridisierung der Plätze. Damit bleiben in diesem Fall V_1, V_2 und ε als freie Parameter übrig. Der Satz der Gitterparameter \mathbf{t} ist nicht Teil der Variationsprozedur. Es sei aber erwähnt, dass die Teilchen-Loch-Transformation (2.9b) im Haldane-Modell den Massenterm invertiert $M \rightarrow -M$ und die komplexe Phase nach $\phi \rightarrow \pi - \phi$ verschiebt.

Die wechselwirkungsfreien Zustandsdichten für verschiedene topologische Phasen des Haldane-Modells sind in Abb. 4.1 zu sehen. Im einfachsten Tight-Binding-Fall, in dem nur das Nächst-Nachbar-Hüpfen $t \equiv 1$ von Null verschieden ist, läuft die Zustandsdichte im Dirac-Punkt bei $\omega = 0$ linear auf Null zu. Materialien dieser Art werden Halbmetalle genannt, da sie auf der einen Seite weder eine endliche Bandlücke, wie ein Isolator, noch eine endliche Zustandsdichte an der Fermi-Kante, wie ein Metall, aufweisen, aber dennoch leitfähig sind, da Elektronen mit infinitesimaler Anregungsenergie vom Valenz- ins Leitungsband gehoben werden können. Durch eine endliche Übernächst-Nachbar-Hüpfamplitude $t_2 > 0$ bei $\phi = 0$ wird der Dirac-Punkt von der Fermi-Kante

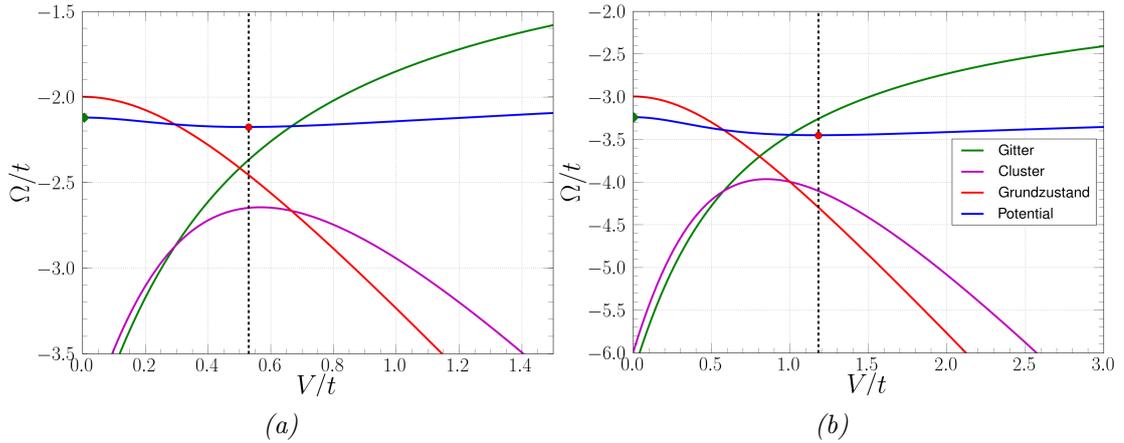


Abbildung 4.2: Das Potential und seine drei Beiträge gemäß Gl. (3.23a) für den Cluster mit zwei Badplätzen. Metallische Potentialminima und das Maximum bei $V = 0$ sind markiert. (a) Semi-elliptische Zustandsdichte und $U/t = W/t = 4$; (b) Bienenwabengitter mit Nächst-Nachbar-Hüpfen und $U/t = W/t = 6$.

weggeschoben und die Zustandsdichte ist nicht mehr symmetrisch $\rho_0(\omega) \neq \rho_0(-\omega)$, denn die Teilchen-Loch-Symmetrie ist hier gebrochen. Zur Wiederherstellung der Teilchen-Loch-Symmetrie muss die komplexe Phase auf $\phi = \pi/2$ fixiert werden. Dieser Fall ist für verschiedene Massen M , für die die Chern-Zahl C_σ einer einzelnen Spinsorte σ verschiedene ganzzahlige Werte annimmt, gezeigt. Alle weisen eine Bandlücke auf, wobei $M/t = 0$ und $M/t = 1$ einen Chern-Isolator, $M/t = 2$ dagegen den topologisch trivialen Bandisolator, der adiabatisch mit dem atomaren Limes verknüpft ist, darstellen. Mit endlichem Massenterm werden A - und B -Untergitter energetisch unterschiedlich gewichtet. Dies sorgt für eine symmetrische Erhöhung bzw. Erniedrigung der Zustandsdichten in Valenz- und Leitungsband. Die Symmetrie $\rho_0^A(\omega) = \rho_0^B(-\omega)$ ist in Abbildung 4.1 deutlich zu sehen.

Ursprünglich als Modell spinloser Fermionen auf dem Bienenwabengitter entwickelt, kann das Haldane-Modell leicht um den Spinfreiheitsgrad erweitert werden, um Hubbard-Wechselwirkungen mit einzuschließen. Diese Erweiterung wird als Haldane-Hubbard-Modell bezeichnet [57]. Die Verdopplung des Haldane-Modells resultiert in einer Verdopplung der spinunabhängigen Chern-Zahl

$$C_{\text{tot}} = C_\uparrow + C_\downarrow, \quad (4.1)$$

die für jede Spinsorte unabhängig bestimmt werden kann, solange S^z eine gute Quantenzahl ist. Die Wechselwirkungsstärke sei stets repulsiv $U > 0$, so dass keine topologischen Supraflüssigkeiten [58, 59] auftreten können.

Im Folgenden wird die Wechselwirkungsstärke U meist mit der Bandbreite W der verwendeten Zustandsdichte gleichgesetzt, da diese eine natürliche Energieskala des betrachteten Systems in Einheiten der Hüpffamplitude t darstellt. Abbildung 4.2 zeigt

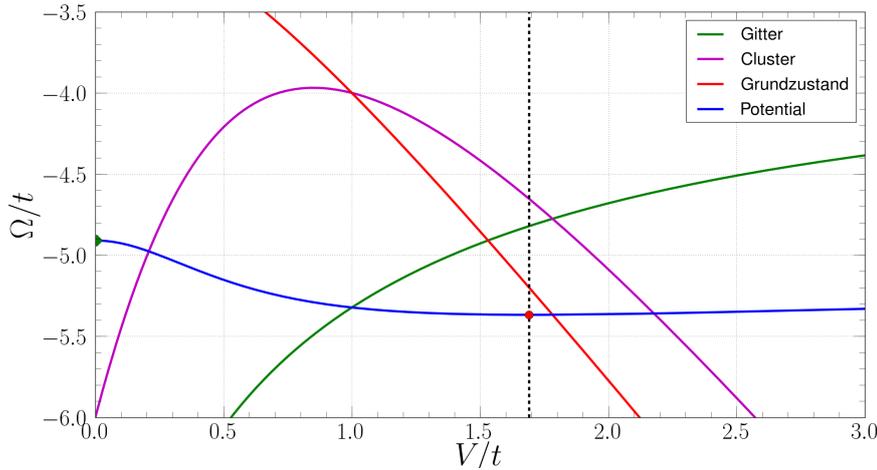


Abbildung 4.3: Das Potential und seine drei Beiträge gemäß Gl. (3.23a) im Haldane-Modell mit gebrochener Teilchen-Loch-Symmetrie, $t_2/t = 0.3$, $\phi = M = 0$ und $U/t = 6$ mit Cluster mit zwei Badplätzen. Metallische Potentialminima und das Maximum bei $V = 0$ sind markiert.

den typischen Potentialverlauf und die drei Beiträge von Grundzustand, Gitter und Cluster, bei fixierten Energien $\varepsilon_c = \varepsilon_a = 0$ in Abhängigkeit der Hybridisierung für eine semi-elliptische Zustandsdichte (3.26) mit $t = 1$ und für das Tight-Binding-Modell des Bienenwabengitters. Außerdem sind diese Größen in Abbildung 4.3 für das Haldane-Modell mit reellem Übernächst-Nachbar-Hüpfen und verschwindendem Massenterm gezeigt. Für alle drei Beispiele zeigen die Beiträge qualitativ ähnliches Verhalten, obwohl das Haldane-Modell mit den verwendeten Parametern die Teilchen-Loch-Symmetrie bricht, wie man an der asymmetrischen Zustandsdichte in Abbildung 4.1 erkennen kann. Während die einzelnen Beiträge stark von V abhängen, ändert sich das großkanonische Potential Ω nur relativ schwach. Zu erkennen ist ein Maximum bei $V = 0$, das einer isolierenden Phase entspricht, und ein Minimum bei endlichem $V = V^*$. Da Ω per Konstruktion gerade in V ist, liegt auch für $V^* \rightarrow -V^*$ ein Minimum vor, das zur gleichen metallischen Phase gehört.

Der größere Cluster mit drei Badplätzen erfordert die Optimierung des Potentials bezüglich dreier Parameter. Standard-Methoden zur Bestimmung des stationären Punktes, wie konjugierte Gradienten oder die Downhill-Simplex-Methode [55], liefern aufgrund von numerischen Schwankungen in den Frequenz-Integralen (3.28d) und Entartung des Minimums inkonsistente Ergebnisse, sodass die Potentiallandschaft im 4-Cluster für äquidistant diskretisierte Ein-Teilchen-Parameter berechnet wird.

Zunächst betrachten wir die Potentiallandschaft für eine semi-elliptische Zustandsdichte. Diese wird in der Literatur oft verwendet, da sie neben einem kompakten Träger günstige analytische Eigenschaften besitzt und die exakte Form der Zustandsdichte für viele Anwendungen nicht zu wichtig ist, wie auch hier im Vergleich des Potentials 4.2a

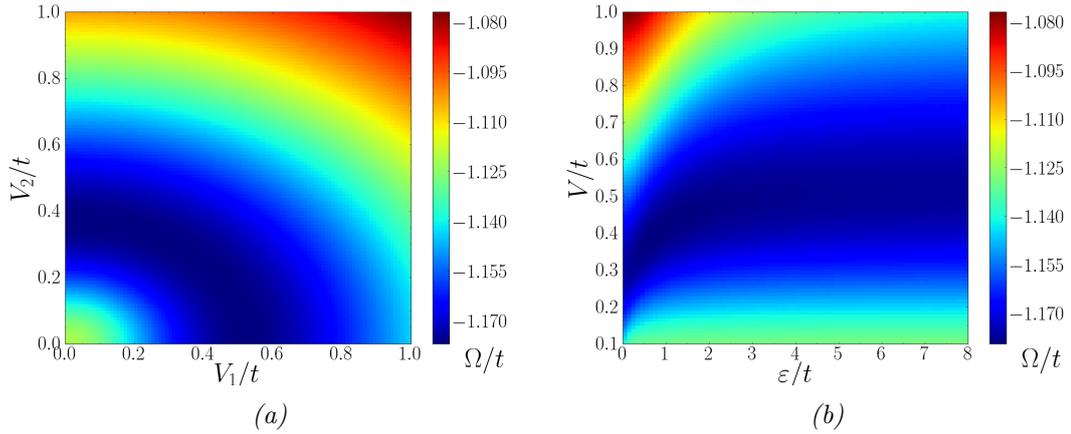


Abbildung 4.4: Potential Ω mit semi-elliptischer Zustandsdichte und $U/t = W/t = 4$, $n_s = 4$; (a) Für festes $\varepsilon = 0$ bildet die Linie der Potentialminima ein Ellipsoid im Raum der V_i , das Maximum bei $V_i = 0$ bleibt erhalten. Es gilt $V_2 = V_3$ wegen Teilchen-Loch-Symmetrie. (b) Variation von $\varepsilon \equiv \varepsilon_2 = -\varepsilon_3$ entlang der Geraden $V_1 = V_2 = V_3 \equiv V$ zeigt statt eines einzelnen Minimums eine entartete Minimumlinie.

mit dem des Bienenwabengitters in Abb. 4.2b zu erkennen. Die Entartung des Potentialminimums zu einer eindimensionalen Minimumlinie ist in Abbildung 4.4a für den Spezialfall, dass alle On-Site-Energien $\varepsilon_i = 0$ sind, zu sehen. Man erkennt, dass das $n_s = 2$ -Minimum für den Fall verschwindender Hybridisierung mit den übrigen Plätzen $V_2 = V_3 = 0$ reproduziert wird. Daneben bleibt das lokale Maximum bei $V_i = 0$ erhalten. Wir finden eine weitere Minimumlinie bei Variation von ε in eine feste Richtung im Raum der V_i , wie in Abbildung 4.4b erkennbar.

Auf dem Bienenwabengitter wird nun die Potentialstruktur und zugehörige Null-Frequenz-(NF-)Selbstenergie $\Sigma(\omega = 0)$ untersucht. Auch hier zeigt das großkanonische Potential keine weiteren stationären Punkte. Bei $n_s = 2$ zeigt Abbildung 4.5a lediglich die bereits bekannten Extrema bei $\varepsilon_a = 0$ und die erwartete Symmetrie bzgl. V und ε_a . Die beiden Bereiche starker und schwächerer Hybridisierung (blau und rot dominierter Bereich) sind durch eine Diskontinuität von Ω voneinander getrennt. Diese Bereiche korrespondieren zu verschiedenen Unterräumen von $\langle N \rangle$, dem Erwartungswert des Teilchenzahloperators. Im hier untersuchten Fall halber Elektronenfüllung ist der blau dominierte Bereich als Unterraum mit $\langle N \rangle = n_s = 2$ relevant. Er enthält das metallische Potentialminimum bei $\varepsilon_a = 0$ und gehört zum Zwei-Teilchen-Unterraum. Die NF-Selbstenergie in Abbildung 4.5b weist neben der Symmetrie $\Sigma(V) = \Sigma(-V)$ die Antisymmetrie $\Sigma(\varepsilon_a) = -\Sigma(-\varepsilon_a)$ auf, die auch auf die Erweiterung des Clusters auf vier Plätze zutrifft. Dabei zeigt auch das Potential (Abbildung 4.5c) in diesem Fall das gleiche qualitative Verhalten wie für die semi-elliptische Zustandsdichte. Die Betrachtung des großkanonischen Potentials auf dem Bienenwabengitter zeigt keine zusätzlichen stationären Punkte, d.h. es werden keine anderen Phasen als im Testmodell

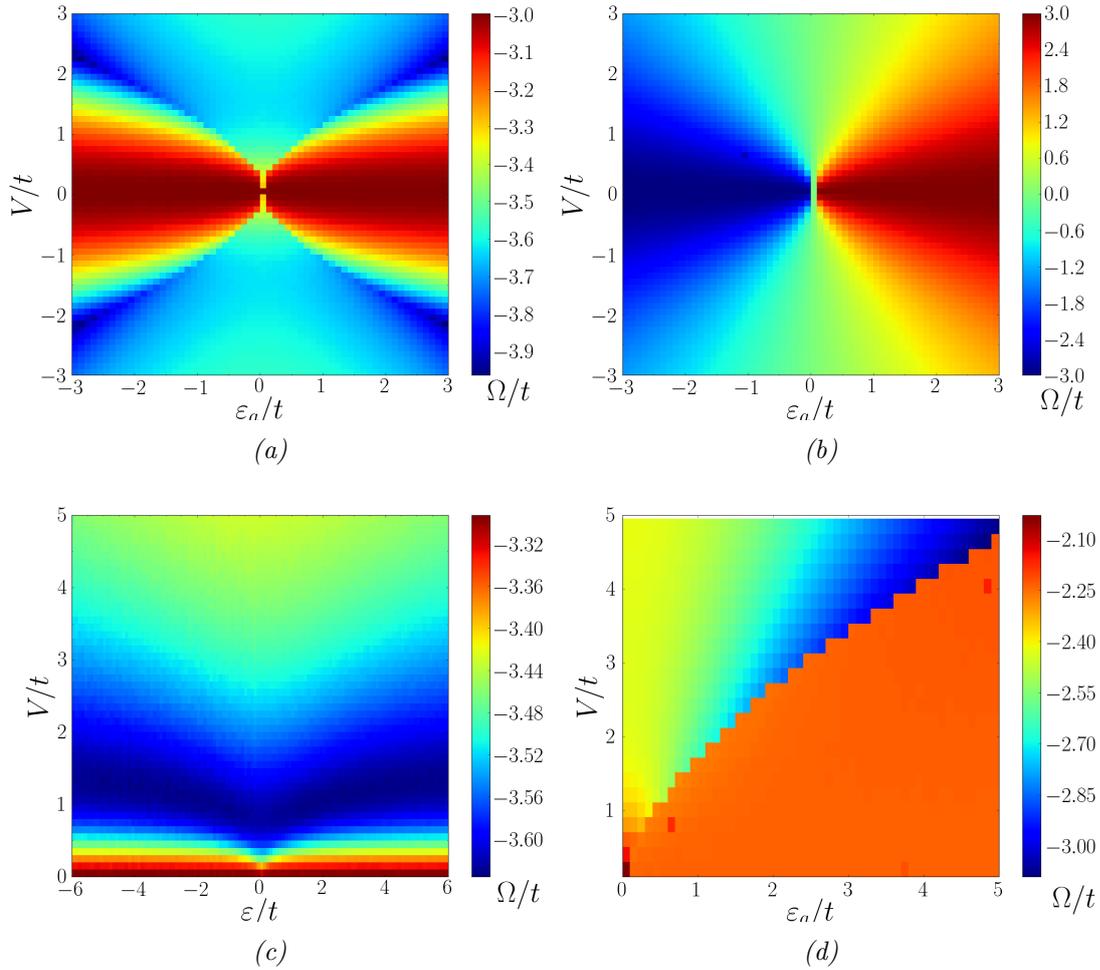


Abbildung 4.5: Großkanonisches Potential Ω für das Tight-binding-Modell mit $U/t = W/t = 6$ auf dem Bienenwabengitter, (a) $n_s = 2$, das Potential ist symmetrisch in beiden Parametern. (b) $n_s = 2$, die Selbstenergie ist in V gerade und in ε_a ungerade. (c) $n_s = 4$, das Potential zeigt das gleiche qualitative Verhalten wie mit semi-elliptischer Zustandsdichte in Abb. 4.4b. (d) Das großkanonische Potential mit $t_2/t = 0.2$, $\phi = 0$ und $U/t = 3$ des 2-Clusters zeigt keine neuen stationären Punkte. Weitere Potentiallandschaften mit $\phi = \pi/2$ und verschiedenen Werten von M und U sind in Appendix A.3 zu finden.

der semi-elliptischen Zustandsdichte angenommen. Teilchen-Loch-Symmetrie fixiert die Ein-Teilchen-Parameter, die für das Auftauchen von lokalen Extrema relevant sind.

Wir wollen nun das Haldane-Modell mit komplexem Übernächst-Nachbar-Hüpfen $t_2/t = 0.2$ mit $\phi = 0$ für $U/t = 6$ betrachten, das die Teilchen-Loch-Symmetrie bricht. Obwohl wir wegen der Aufhebung dieser Einschränkung durch die Symmetrie neue nicht-triviale Sattelpunkte des Potentials, die zusätzlichen Phasen des erweiterten Modells

entsprechen, erwarten, zeigt Abbildung 4.5d keine neuen Sattelpunkte. Es ist jedoch eine stärkere Abhängigkeit von V und ε_a im Zwei-Teilchen-Unterraum zu erkennen, während sich das Potential im Vergleich zum rot dominierten Bereich in Abb. 4.5a nur wenig ändert.

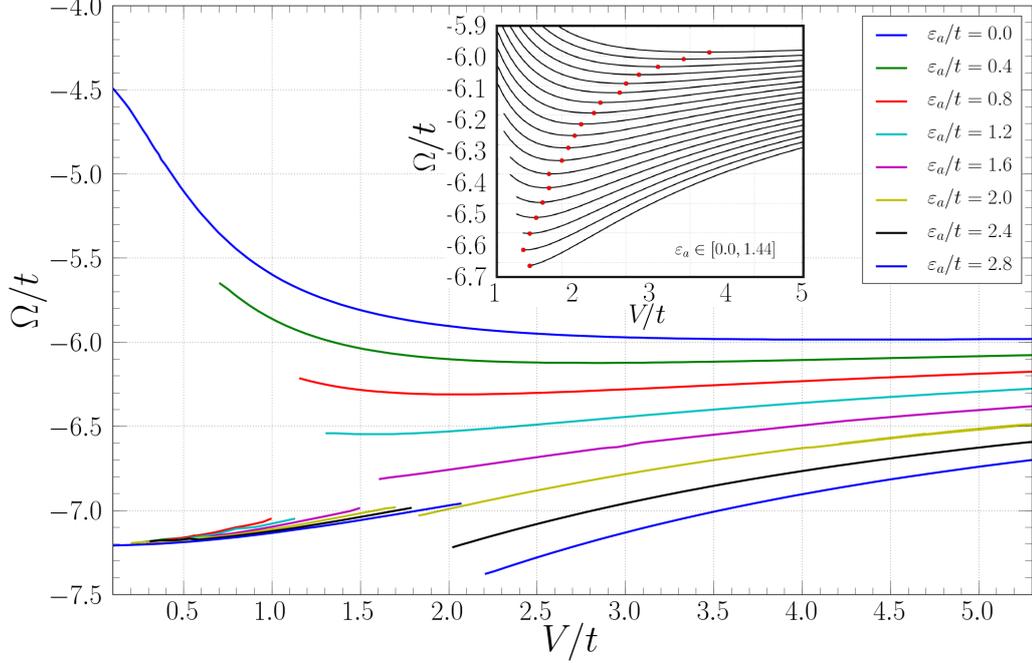


Abbildung 4.6: Das Potential Ω des Haldane-Modells mit $t_2/t = 0.2$ und $\phi = 0$ bei Ankopplung des 2-Clusters zeigt für feste Werte von ε_a mit $U/t = 6$ rechts des Sprungs weitere Extrema in einem schmalen ε -Band. Minima sind in der vergrößerten Ansicht im Bereich $V/t \in [1, 5]$ markiert. Die oberste Kurve entspricht hier $\varepsilon_a = 0$, die unterste gehört zu $\varepsilon_a = 1.44$. Die Diskontinuität rührt vom Wechsel des Teilchenzahlunterraums her. Der Minimalwert des Potentials an der Diskontinuität für $\varepsilon_a/t > 1.2$ stellt kein physikalisches Potentialminimum dar.

Nachdem ein Teilchen-Loch-Symmetrie brechender Term ebenfalls nicht in der Lage ist, weitere Sattelpunkte zu erzeugen, wenden wir uns nun dem Bruch der Inversions-symmetrie zu. Im ersten Schritt stellen wir fest, dass sich für fixiertes $\varepsilon_a > 0$ in einer Umgebung von $\varepsilon_a = 0$ noch ein Minimum in V findet, bevor das Potential ab einem gewissen $\varepsilon_a = \varepsilon^*$ hinter der Diskontinuität nur noch monoton ansteigt, was am Beispiel des Haldane-Modells mit reellem Übernächst-Nachbar-Hüpfen $t_2/t = 0.2$ und $\phi = 0$ Abbildung 4.6 für ausgewählte Werte von ε_a illustriert. Die vergrößerte Ansicht zeigt das Verschwinden des Minimums im Zwei-Teilchen-Unterraum mit von Null an wachsendem On-Site-Potential ε_a . Der Minimalwert des Potentials, der in der Diskontinuität angenommen wird, hat keine physikalische Bedeutung.

Einer unterschiedlichen Gewichtung der beiden Gitterplätze in der Einheitszelle des Bienenwabengitters durch einen Massenterm $M > 0$ wollen wir durch die Wahl $\varepsilon_a^{A/B} = \pm\varepsilon$ gerecht werden. Mit Masse $M > 0$ wird durch diese Wahl die Inversionsymmetrie extern gebrochen. Es handelt sich nicht um spontane Symmetriebrechung, die im Falle eines zusätzlichen stationären Punktes bei endlichem ε stattfände. Da ein Massenterm im Haldane-Hamilton-Operator für die topologischen Eigenschaften des Systems mitverantwortlich ist, wird im nächsten Abschnitt der Effekt einer Untergitterstruktur und das Zusammenspiel mit der Wechselwirkung U untersucht.

4.2 Isolierende Phasen und Untergitterstruktur

Das Bienenwabengitter besitzt eine Einheitszelle mit zwei Plätzen, die über den Massenterm M im Haldane-Hamilton-Operator (Haldane-Masse) unterschiedlich gewichtet werden können. Dessen Effekt ist im Rahmen des Phasendiagramms des Haldane-Modells (Abb. 2.6) gut verstanden, in dem die komplexe Phase ϕ und der Massenterm M bei gegebenem Übernächst-Nachbar-Hüpfen t_2 die Topologie der Energiebänder bestimmt.

Wir untersuchen zunächst, ob die analytische Form der Selbstenergie (3.31) erweitert werden kann, um die Ankopplung zweier unterschiedlicher SIAMs an die Gitterplätze der Einheitszelle zu beschreiben. Die Selbstenergien der A - und B -Cluster tragen zum Diagonalterm der Hamilton-Matrix gemäß

$$H = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \Sigma_A(\omega) & 0 \\ 0 & \Sigma_B(\omega) \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

bei. Wir können ihren Effekt als mittleren Beitrag und als Differenzterm

$$\bar{\Sigma}(\omega) = \frac{\Sigma_A(\omega) + \Sigma_B(\omega)}{2} \quad \text{und} \quad \mathcal{M}(\omega) = \frac{\Sigma_A(\omega) - \Sigma_B(\omega)}{2} \quad (4.3)$$

formulieren, der wie eine Haldane-Masse den Potentialunterschied zwischen Platz A und B verkörpert und somit bei gegebener Phase ϕ und Amplitude t_2 die Topologie des Systems bestimmt. Der Mittelwert $\bar{\Sigma}(\omega)$ sollte wie in einem ungewichteten einzelnen Cluster die Frequenz $\omega \rightarrow \omega - \bar{\Sigma}(\omega)$ verschieben und durch den frequenzabhängigen Massenterm $\mathcal{M}(\omega)$ modifiziert werden. In Abbildung 4.7 vergleichen wir die numerischen Daten der wechselwirkenden Green-Funktion mit der durch die analytisch bekannte Form der Selbstenergie für einen Badplatz und ohne On-Site-Energien nach Gl. (3.31) bestimmte Green-Funktion. Zu sehen sind Datenpunkte der numerisch ausgewerteten wechselwirkenden Cluster-Green-Funktionen für einen positiv (negativ) gewichteten Badplatz am $A(B)$ -Untergitter und die nach den Gln. (2.16a) und (3.31) bestimmte analytische Form der wechselwirkenden Green-Funktion

$$G'_{A/B}(\omega) = (\omega - \varepsilon_c - \Delta(\omega) - \Sigma(\omega))^{-1} \quad (4.4a)$$

$$= \left(\omega - \varepsilon_c - \frac{V^2}{\omega - \varepsilon_a} - \frac{U^2}{8} \left(\frac{1}{\omega - 3V} + \frac{1}{\omega + 3V} \right) \pm \mathcal{M}(\omega) \right)^{-1} \quad (4.4b)$$

mit Gewichtung der Untergitter durch den numerisch bestimmten Massenterm $\mathcal{M}(\omega)$ gemäß Gl. (4.3). Die optimale Hybridisierung für die verwendete Wechselwirkungsstärke $U/t = 5$ beträgt $V^*/t = 1.26$ für das Tight-Binding-Bienenwabengitter. Deutlich zu erkennen ist eine starke Abweichung an den äußeren beiden Polen von $G_{A/B}$, die durch den starken Einfluss der Selbstenergie bei diesen Frequenzen zu erklären ist. Die Selbstenergie nach Gl. (3.31) hat Pole in der Nähe von $\omega/t = \pm 4$, die durch die beiden Band-Energien zu leicht höheren bzw. niedrigeren Frequenzen verschoben werden. In der Nähe von $\omega = 0$ finden wir eine gute Übereinstimmung der Polstruktur. Insgesamt erscheint dieser Ansatz jedoch ungeeignet zur Bestimmung der Selbstenergie aus dem analytischen Ausdruck (3.31).

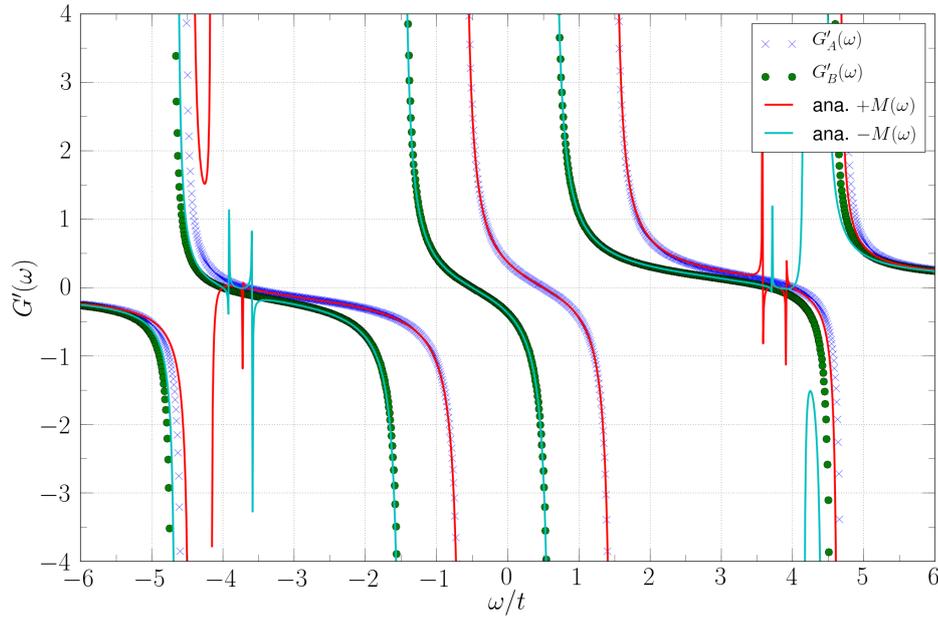


Abbildung 4.7: Die durchgezogenen Linien zeigen die analytische Form der wechselwirkenden Green-Funktion (4.4b), die durch den numerisch bestimmten Massenterm der A - und B -Cluster-Selbstenergien mit zugehörigem Bandpotential $\varepsilon_a^{A/B} = \pm 0.5$ modifiziert wird. Zum Vergleich sind die numerischen Daten der vollen Green-Funktionen als diskrete Punkte gezeigt. Man erkennt, dass dieses Verfahren keine gute Näherung an die wechselwirkende Green-Funktion bei nicht-trivialer Untergitterstruktur liefert.

Wir wollen untersuchen, welchen Effekt die Ankopplung von zwei unterschiedlichen SIAMs an die einzelnen Untergitterplätze hat, um ein Haldane-Modell mit endlicher Masse und starker Wechselwirkung zu beschreiben. Es wurde bereits im vorherigen Kapitel am Beispiel $\phi = 0$ beobachtet, dass es im Haldane-Modell mit $t_2 > 0$ einen Bereich $\varepsilon_a \in [0, \varepsilon^*]$ gibt, der für festes ε_a ein Minimum in V aufweist. Dieses Verhalten zeigt Abbildung 4.6 und es bleibt auch in der topologischen Phase des Haldane-Modells

mit $\phi = \pi/2$ erhalten. Zur Untersuchung von Phasen mit endlicher Haldane-Masse $M > 0$ wird eine symmetrische Ankopplung mit On-Site-Energie $\varepsilon_a^A = \varepsilon$ auf dem A -Untergitter und $\varepsilon_a^B = -\varepsilon$ auf dem B -Untergitter vorgenommen. Bei festem ε wird die optimale Hybridisierung $V^*(\varepsilon)$ gemäß Gl. (3.11) über die lokalen Gitter- und Cluster-Green-Funktionen (3.18) und (3.22b) ermittelt, die nun bei nicht-trivialer A/B -Struktur verschieden zum großkanonischen Potential und dessen Optimierung beitragen. Mittels Regula-Falsi-Methode wird im 2-Cluster die optimale Hybridisierungsstärke für gegebene Wechselwirkung für verschiedene Parameter des Haldane-Modells bestimmt.

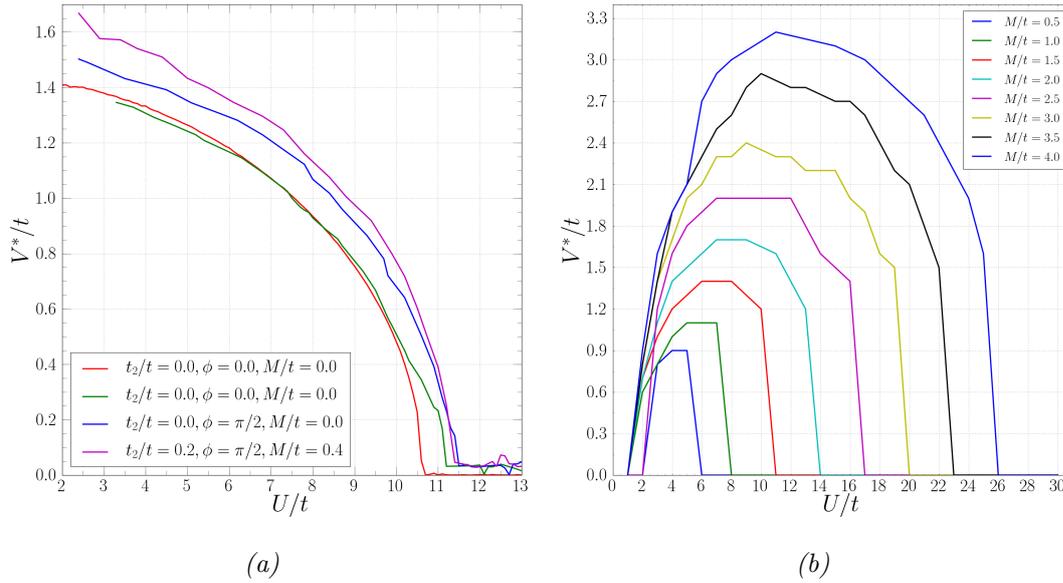


Abbildung 4.8: (a) Die konvergierten Hybridisierungen V^* des 2-Clusters fallen für verschiedene Parameter des Haldane-Modells im erwarteten Bereich des Mott-Übergangs $U_c/t \approx 10 - 13$ auf $V^* = 0$ ab. (b) Isolierende Phasen im Haldane-Modell mit $t_2/t = 0.2$ und $\phi = \pi/2$ mit größer werdenden Massen bleiben für schwache Wechselwirkung stabil. Zwischen Chern- bzw. Band-Isolator mit $V^* = 0$ und dem Mott-Isolator für große U existiert eine Zwischenphase mit endlichem $V^* > 0$. Zur Untersuchung wurde ein festes On-Site-Potential $\varepsilon_a^{A/B} = \pm 0.5t$ verwendet.

Abbildung 4.8a zeigt $V^*(\varepsilon = 0)$ in Abhängigkeit der Wechselwirkungsstärke. Für verschiedene Haldane-Parameter und $\varepsilon = 0$ sind in Abbildung 4.8a unterschiedliche kritische Wechselwirkungsstärken zum Mott-Übergang U_c deutlich zu sehen. Gegenüber dem Tight-Binding-Bienenwabengitter ist zur Unterdrückung der Elektronenmobilität mit endlichem Übernächst-Nachbar-Hüpfen eine stärkere Wechselwirkung nötig. Eine zusätzliche komplexe Phase verstärkt diesen Effekt noch und die hinreichend kleine Masse von $M/t = 0.4$ hat keinen nennenswerten Einfluss auf die kritische Wechselwirkung. Mit endlicher Energie auf den Badplätzen $\varepsilon/t = 0.5$ wird auch der Fall einer großen Haldane-Masse $M/t = 4$ untersucht. Als „groß“ werden Massen bezeichnet, die im

Zusammenspiel mit den übrigen Haldane-Parametern im wechselwirkungsfreien Fall den topologisch trivialen Fall des Band-Isolators induzieren. Der hier betrachtete Wert $t_2/t = 0.2$ legt im Maximalfall $\phi = \pi/2$ diesen kritischen Wert der Masse gemäß Gl. (2.27) auf $M_c/t \approx 1.04$ fest.

Der Bandisolator korrespondiert zum stationären Punkt des Potentials bei $V^* = 0$ im wechselwirkungsfreien Fall, den Abbildung 4.8b zeigt. Dieser Punkt bleibt für kleine Werte von $U/t \lesssim 2$ stabil. Darüber hinaus, und vor dem Eintritt in die Mottphase für große U , die wiederum ihren stationären Punkt bei $V^* = 0$ hat, zeigt das Potential einen weiteren stabilen stationären Punkt bei endlichem $V^* > 0$ in einem breiten Band von Wechselwirkungsstärken. In diesem Bereich koexistiert $V^* = 0$ als weiterer stationärer Punkt. Er ist jedoch hier, im Gegensatz zur Band- und Mott-Isolator-Phase, ein lokales Maximum des großkanonischen Potentials Ω und somit instabil. Aufschluss über die elektronischen Eigenschaften von Phasen mit endlichem $V^* > 0$, und speziell der neuen Phase zwischen Band- und Mott-Isolator, kann die wechselwirkende Zustandsdichte $\rho_U(\omega)$ geben.

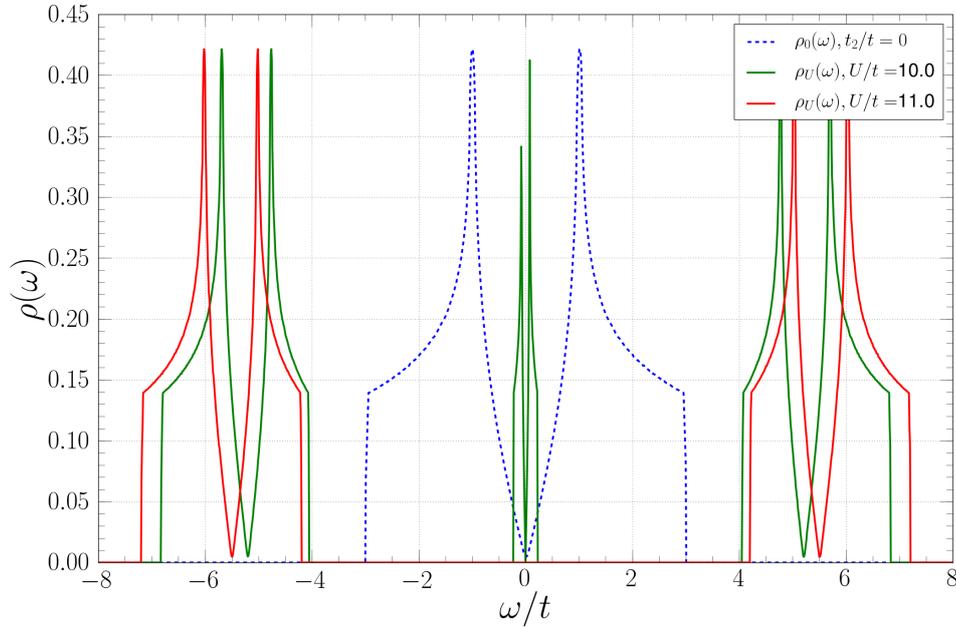


Abbildung 4.9: Freie und wechselwirkende Zustandsdichten; Im Tight-Binding Bienenwabengitter verschwindet das mittlere Band und die Mott-Bandlücke öffnet sich zwischen $U/t = 10$ und $U/t = 11$.

Nach Optimierung der Cluster-Parameter zu gegebener Wechselwirkung U ist die physikalische Selbstenergie des Gitters bekannt. Sie bestimmt über Gl. (3.21) maßgeblich die Gestalt der lokalen Zustandsdichte, an der das Öffnen und Schließen von Bandlücken deutlich erkennbar ist. Zur Identifikation neuer wechselwirkungsinduzierter Phasen

betrachten wir nun wie die freie Zustandsdichte $\rho_0(\omega)$, die durch die Selbstenergie gemäß Gl. (2.13) bzw. Gl. (3.21) modifiziert wird.

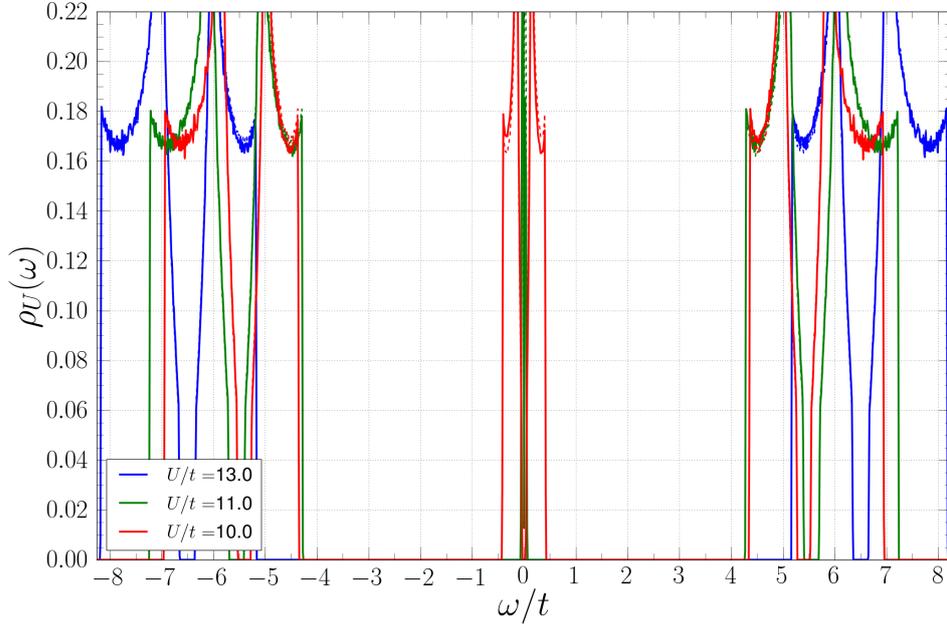


Abbildung 4.10: Für $t_2/t = 0.2$ und $\phi = \pi/2$ existiert auch ohne Masse $M = 0$ schon vor dem Mott-Übergang eine Bandlücke. Die Lücke schließt sich, in dem für steigendes U das Mittelband schmaler wird und schließlich das gesamte Gewicht bei $U = U_c$ verschwindet.

Zunächst wird das Tight-Binding-Bienenwabenmodell als einfachster Fall des Haldane-Modells mit $t_2 = \phi = M = 0$ untersucht. Bei endlichen V^* verschwindet die wechselwirkende Zustandsdichte in der Bandmitte aber besitzt keine endliche Bandlücke (vgl. Abbildung 4.9). Es handelt sich um ein Halbmetall. Es existiert ein schmaler werdendes Band in der Nähe der Fermi-Kante mit niedriger Bandkrümmung. Dies impliziert eine hohe effektive Masse der Quasiteilchen, sogenannter schwerer Fermionen. Die symmetrischen Bänder links und rechts des mittleren Bandes gehören zu Löchern bzw. Doppelbesetzungen ($|\omega|/t \approx 4 - 7$) im Gitter. Sobald für hinreichend starke Wechselwirkung der einzige stationäre Punkt des Potentials bei $V^* = 0$ liegt, erzeugt der Pol der Selbstenergie bei $\omega = 0$ eine Bandlücke in der Zustandsdichte. Dieser Prozess markiert den Übergang des Systems in die Mott-Isolator-Phase. Die Lücke bei großem U ist für alle untersuchten Parameter des Haldane-Modells zu finden und korrespondiert zur Mott-Isolator-Phase, die für Referenzmodelle, die lokal an Gitterplätze koppeln, üblicherweise bei $U_c/t \approx 10 - 13$ gefunden wird [60, 61].

Im Haldane-Modell mit endlichem Übernächst-Nachbar-Hüpfen kann das System schon vor Eintritt in die Mott-Phase eine Bandlücke aufweisen, wie Abbildung 4.10 (und

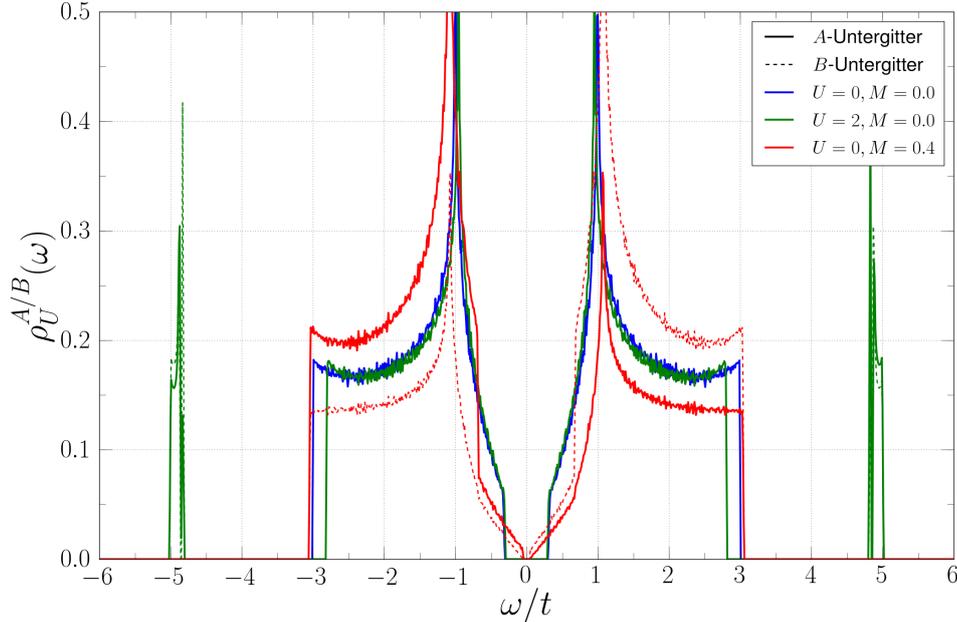


Abbildung 4.11: Die Bandlücke der lokalen Zustandsdichte des Haldane-Modells mit $t_2 = 0.2$ und $\phi = \pi/2$ wird durch schwache Wechselwirkung nicht verändert. Es bilden sich schmale Seitenbänder. Ein hinreichend kleiner Massenterm $M = 0.4$ verringert die Lücke ohne sie zu schließen und gewichtet Valenz- und Leitungsband unterschiedlich für A - bzw. B -Untergitter.

4.13) zeigt. Dies wird im Grenzfall verschwindender Wechselwirkung mit Betrachtung des Phasendiagramms des Haldane-Modells (2.6) offensichtlich, in dem der topologisch triviale Band-Isolator durch einen topologischen Phasenübergang vom Chern-Isolator mit Chern-Zahl $C = 1$ getrennt ist. Mit hinreichend großem Massenterm liegt vor dem Mott-Übergang ein Band-Isolator, für geeignete Parameterwahl mit komplexem Übernächst-Nachbar-Hüpfen ein Chern-Isolator, vor, dessen Lücke in Abbildung 4.11 zu sehen ist (vgl. dazu auch den wechselwirkungsfreien Fall in Abbildung 4.1). Auch bevor die Mott-Lücke öffnet haben verschiedene Referenz-Cluster in der Einheitszelle des Haldane-Modells auch für kleine Wechselwirkungsstärken Einfluss auf die Bandlücke, was intuitiv durch Vergleich mit einem Haldane-Massenterm verstanden werden kann. Beispielhaft ist in Abbildung 4.11 die Zustandsdichte mit Bandlücke für ein vergleichsweise niedriges $U/t = 2$ zu sehen. An den Seiten bilden sich für schwache Wechselwirkung schmale Seitenbänder aus, während die Zustandsdichte um die Fermi-Energie $\mu = 0$ herum nur wenig verändert wird. Erst in der Nähe des Mott-Übergangs zeigt sie die bereits erwähnte hohe effektive Masse schwerer Quasiteilchenanregungen. Mit wachsendem U werden die beiden mittleren Bänder in Abbildung 4.10 zusammengestaucht, sodass die Bandlücke erst bei $U = U_c$ verschwindet und für kleinere und größere U endlich ist.

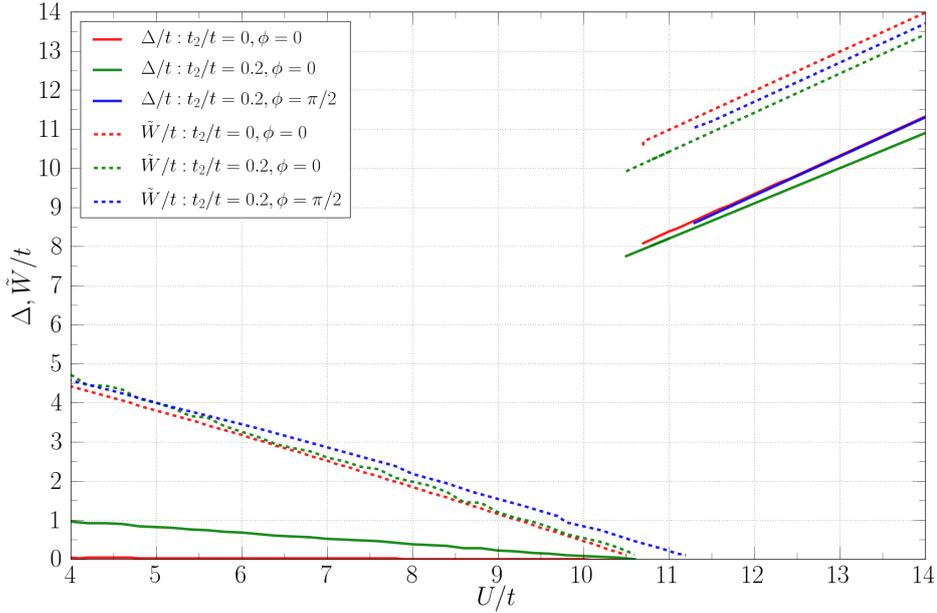


Abbildung 4.12: Die Bandlücke Δ und Bandbreite der inneren Bänder \tilde{W} an der Fermi-Kante wird mit steigender Wechselwirkung verringert. Beide laufen linear auf die kritische Wechselwirkung U_c zu. Beim Mott-Übergang verschwindet das Gewicht der Zustandsdichte in der Bandmitte, sodass Δ und \tilde{W} danach sprunghaft ansteigen und wieder linear mit wachsendem U zunehmen.

Dieses Verhalten wird auch durch die Veränderung der Bandlücke Δ und der Bandbreite der beiden inneren Bänder \tilde{W} , d.h. Valenz- und Leitungsband, um die Fermi-Kante $\omega = 0$ in Abhängigkeit von U deutlich (Abb. 4.12). Dazu gehen wir von einem Haldane-Modell mit verschiedenen Parameter-Konfigurationen mit verschwindender Masse aus. Man erkennt, dass unterhalb des Mottübergangs bei U_c keine Zustände an der Fermi-Kante existieren, also kein metallisches Verhalten vorliegt, da Δ und \tilde{W} stets endlich bleiben und bei $U = U_c$ linear gegen Null laufen. Die mittleren Bänder der Zustandsdichte werden mit wachsendem U zusammengestaucht und verschwinden am Mott-Übergang. Dabei geht das Gewicht in der Mitte der Zustandsdichte verloren und die nächst-äußeren Bänder begrenzen die Bandlücke. Dies ist deutlich am Sprung von Δ und \tilde{W} beim Übergang in die Mott-Phase zu sehen.

Eine große Masse verschiebt den Mott-Übergang zu extremen Werten der kritischen Wechselwirkungsstärke und induziert eine Zwischenphase zwischen dem Band- und dem Mott-Isolator, deren elektronische Eigenschaften an der Zustandsdichte erkennbar sind. Das Beispiel bei $M/t = 4$ zeigt in Abbildung 4.13 in deutlicher Weise die Bandlücke in der Zustandsdichte über einen großen Bereich von U , die mit einem Cluster-Parameter $\varepsilon/t = 0.5$ in Übereinstimmung mit Abbildung 4.8b erzeugt wurde. Innerhalb der Zwi-

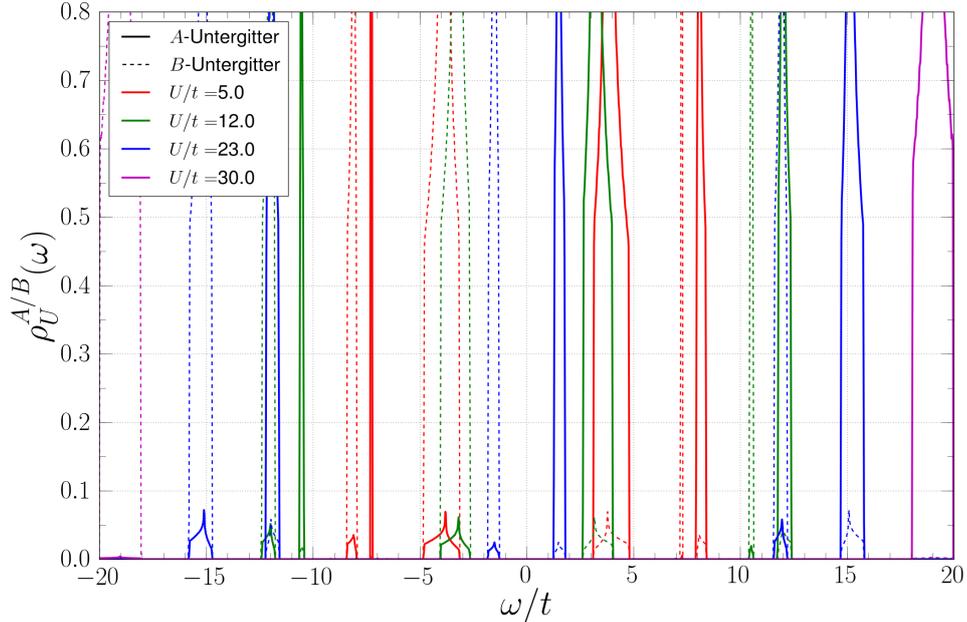


Abbildung 4.13: Die Lücke ist für die Zustandsdichte mit $M/t = 4$ deutlich zu sehen. Sie schließt bei $U = U_c$ durch Stauchung der inneren Bänder hin zu $\omega = 0$ und ist in der Mott-Phase ($U > U_c$) wieder endlich. Die durchgezogenen Linien entsprechen der Zustandsdichte des A -Untergitters. Die dazu symmetrische Zustandsdichte des B -Untergitters ist gestrichelt abgebildet.

schenphase bewegen sich die inneren Bänder auf die Fermi-Kante zu und liegen jenseits des Mott-Übergangs bei $U/t = 30$ wieder weit von dieser entfernt.

In Abwesenheit von Wechselwirkung kann sich das System in der Chern- oder Band-Isolator-Phase, die beide eine endliche Bandlücke besitzen und für gegebene Haldane-Parameter t_2 und ϕ durch den Massenterm M unterschieden werden, befinden. Zwischen dem Grenzfall verschwindender Wechselwirkung und dem Mott-Isolator, der topologisch trivial ist, muss die Bandlücke schließen. Die Ausbildung einer weiteren Phase mit Bandlücke wurde in diesem Abschnitt beobachtet. Sie ist weder mit dem nicht wechselwirkenden Isolator bei $U = 0$ noch mit dem Mott-Isolator im Grenzfall großer U , deren stationäre Punkte bei $V^* = 0$ liegen, verknüpft. Stattdessen wird diese lückenbehaftete Zwischenphase mit einem Potentialminimum bei endlichem $V^* > 0$ realisiert. Wir erwarten im Kontext der Theorie der topologischen Hamilton-Operatoren, dass die lokale Null-Frequenz-Selbstenergie in Gl. (2.17b) wie ein Massenterm Einfluss auf die topologische Natur des Systems nimmt. Daher untersuchen wir nun die isolierende Zwischenphase auf ihre topologische Natur.

4.3 Topologischer Hamilton-Operator

Vanhala et. al. beschreiben in Ref. [62] zwei topologisch nicht-triviale Phasen zwischen dem Mott-Isolator für große U und dem Band-Isolator, der mit endlichem Massenterm M ohne Wechselwirkung realisiert wird. Es wurde ein Haldane-Hubbard-Modell mit $t_2/t = 0.2$ und $\phi = \pi/2$ betrachtet. Sie finden eine Phase mit Chern-Zahl $C_{\text{tot}} = 2$, in der sich jede Spinsorte einzeln in einer topologisch nicht-trivialen Phase mit $C_\sigma = 1$ befindet, bei kleinen Massen und niedriger Wechselwirkungsstärke. Für große Massen M und starke Wechselwirkung U treten die Prozesse der Coloumb-Abstoßung, kinetischen Energie und der Einfluss der unterschiedlich gewichteten Untergitter durch den Massenterm miteinander in Konkurrenz. Ein Zwischenregime in der Gegend $M \approx U/2$ mit nicht-trivialer Topologie und Chern-Zahl $C_{\text{tot}} = 1$ wird mittels DMFT, ED und einem Mean-Field-Ansatz diskutiert. Eine Spinsorte bleibt topologisch trivial, ihr mittleres Feld wirkt jedoch dem Massenterm entgegen, sodass die andere Spinsorte einen verminderten Massenterm „sieht“, der schwach genug ist, um die topologisch nicht-triviale Phase für diese Spinsorte beizubehalten. Die Spin-Symmetrie des Haldane-Hamilton-Operators (2.20) wird also spontan gebrochen.

Wir verwenden den topologischen Hamilton-Operator (2.17a), um die Chern-Zahl des wechselwirkenden Problems zu bestimmen. Die NF-Selbstenergie modifiziert wie ein Massenterm die Diagonalelemente des Hamilton-Operators wie in Gl. (4.2) für symmetrische SIAM-Ankopplung mit $\varepsilon_a^{A/B} = \pm\varepsilon$ und kann das System gegenüber dem wechselwirkungsfreien Fall aus der topologischen Chern-Isolator-Phase hinaus oder erst in diese hineintreiben. Abbildung 4.14 zeigt ein grobes Phasendiagramm im untersuchten Parameter-Regime. Die Phasengrenzlinien der in Ref. [62] bestimmten Phasen sind mit eingezeichnet.

Man erkennt, dass die DIA eine deutlich kleinere Region mit $C_{\text{tot}} = 2$ liefert als die beiden anderen gezeigten Methoden. Das DMFT-Ergebnis sollte eine genauere Beschreibung ermöglichen, da sie den Grenzfall unendlich vieler Badplätze der DIA darstellt. Während die Mean-Field-Methode räumliche Korrelationen erfasst, werden diese in DMFT vernachlässigt, um dafür dynamische Korrelationen exakt zu beschreiben. Daher ist es auffällig, dass die Phasengrenzlinie für kleine U für DMFT und Mean-Field-Methode auf denselben M -Wert zuläuft, die DIA jedoch abweicht. Andererseits erscheint es plausibel, dass für verschwindende Masse M die DIA den Übergang zur topologisch trivialen Phase zwischen dem Mean-Field- und dem DMFT-Wert für U_c findet. Mit der hier verwendeten Methode der DIA konnte die spingebrochene Phase mit $C_{\text{tot}} = 1$ nicht detektiert werden. In der einzigen topologischen Phase trägt jede Spinsorte einzeln die Chern-Zahl $C_\sigma = 1$, die für einen relativ großen Bereich von M und U erhalten bleibt. Über diese hinaus, finden wir zwischen Band- und Mott-Isolator zwar eine Zwischenphase, in der sich der stationäre Punkt des großkanonischen Potentials ändert (vgl. Abbildung 4.8b). Tief in dieser Phase bleibt die Chern-Zahl aber trivial.

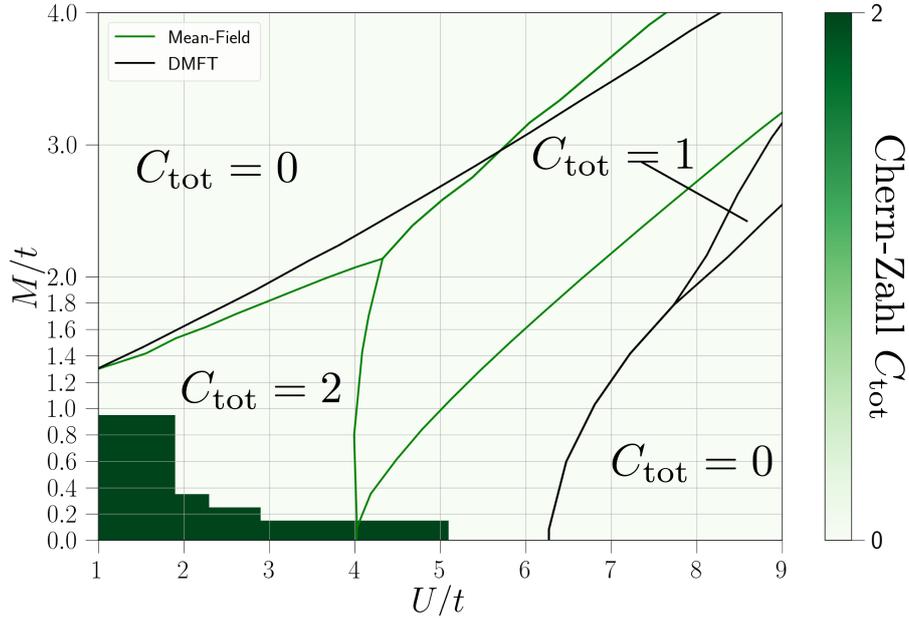


Abbildung 4.14: Grob diskretisiertes Phasendiagramm mit Chern-Zahlen für verschiedene Werte von M und U bei fixierter komplexer Phase $\phi = \pi/2$ und $t_2/t = 0.2$ im wechselwirkenden Haldane-Modell. Die Chern-Zahl wurde an den Schnittpunkten der Koordinatenlinien bestimmt. Für kleine Massen und Wechselwirkungen bleibt das topologische Regime des freien Haldane-Modells erhalten. Wir finden keine Zwischenphase, in der die Spinsymmetrie spontan gebrochen wird. Zum Vergleich sind die Grenzlinien zwischen topologisch verschiedenen Phasen aus Ref. [62] eingezeichnet.

Um magnetische Ordnung und spontane Brechung der Spinsymmetrie, wie Vanhala et al. sie diskutieren, im Rahmen der SFT adäquat zu beschreiben, muss ein zusätzlicher Term

$$H'_{\text{mag}} = B' \sum_i e^{i\vec{Q}\vec{r}_i} (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}), \quad (4.5)$$

mit $n_{i\sigma}$ dem Teilchenzahl-Operator zur Spinsorte σ am Gitterplatz \vec{r}_i und dem antiferromagnetischen Wellenvektor \vec{Q} , im Hamilton-Operator des Referenzsystems berücksichtigt werden [52]. Die Feldstärke B' dieses fiktiven Magnetfeldes kann am stationären Punkt einen von Null verschiedenen Wert annehmen und so die Symmetrie zwischen \uparrow - und \downarrow -Spins brechen. In diesem Fall könnte das mittlere Feld einer Spinsorte den effektiven Massenterm für die andere Spinsorte verändern, sodass sich diese dann in einer Phase anderen topologischen Charakters befindet. Die Untersuchung des Effekts eines fiktiven Magnetfeldes im Referenzsystem geht über den Rahmen dieser Arbeit hinaus und wurde folglich nicht vorgenommen.

In diesem Kapitel wurde die Form des großkanonischen Potentials für ein zugrundeliegendes Haldane-Hubbard-Modell in verschiedenen Parameter-Regimen diskutiert. Das Augenmerk lag dabei auf der Ankopplung von SIAM-Clustern mit zwei bzw. vier Gitterplätzen an das Bienenwabengitter. Der Effekt einer A/B -Untergitterstruktur wurde untersucht und das Verhalten der wechselwirkenden Zustandsdichten und ihrer Bandlücken beobachtet, um den Mott-Übergang und eine Zwischenphase zwischen Band- und Mott-Isolator zu identifizieren. Darüber hinaus wurde ein topologisches Phasendiagramm im Parameterraum aus Masse M und Wechselwirkung U erstellt. Im folgenden, letzten Kapitel werden die Erkenntnisse dieser Arbeit zusammengefasst und ein Ausblick für mögliche weitere Forschungsvorhaben gegeben.

5 Zusammenfassung & Ausblick

In dieser Arbeit wurden die Auswirkungen von Wechselwirkungseffekten auf das Haldane-Modell bei Abwesenheit von thermischen Fluktuationen untersucht. Das Haldane-Modell stellt eines der ersten erdachten Gitter-Modelle zur Demonstration der tiefen Bedeutung, die Topologie für die Physik der Quantenphasen und Quantenphasenübergänge spielt, dar. Es läutete einen Paradigmenwechsel in der theoretischen und experimentellen Betrachtung von topologischen Systemen ein und ermöglichte die experimentellen Realisierung von topologischen Isolatoren und womöglich in Zukunft topologischen Supraleitern [63].

Das ursprünglich wechselwirkungsfreie Haldane-Modell zeichnet sich durch zwei Phasen unterschiedlichen topologischen Charakters aus, die nicht ohne Schließen einer Bandlücke ineinander überführt werden können, obwohl es keinen lokalen Ordnungsparameter gibt. Der topologisch triviale Band-Isolator ist adiabatisch mit dem atomaren Limes verknüpft. Der Fokus lag in dieser Arbeit auf wechselwirkungsinduzierten Quantenphasen, d. h. solchen Phasen, in denen die topologische Invariante, die Chern-Zahl, durch die Anwesenheit der Wechselwirkung nicht-triviale Werte annimmt oder eine topologische Phase des Systems durch Anwesenheit der Wechselwirkung zusammenbricht. Als methodischer Zugang zur Identifikation von stabilen Quantenphasen wurde die Selbstenergiefunktional-Theorie und innerhalb dieser die Dynamische Störstellen-Approximation gewählt. Die SFT bietet einen thermodynamisch konsistenten Formalismus zur Untersuchung von stark-korrelierten Elektronensystemen, der nur wenige Näherungen bei der Bestimmung des großkanonischen Potentials benötigt.

Wir haben zu Beginn die topologische Bandtheorie, die für wechselwirkungsfreie Systeme formuliert ist, dargelegt und durch Vergleich mit dem Hubbard-Modell einige Aspekte aufgezeigt, die bei der Behandlung von Wechselwirkung in diesen Systemen berücksichtigt werden müssen. Unter dem Gesichtspunkt der Bulk-Edge-Correspondence wurde die Notwendigkeit einer Klassifikation der Topologie des Systems aufgrund von Bulk-Eigenschaften motiviert, der der Formalismus des topologischen Hamilton-Operators gerecht wird. Durch die Betrachtung des großkanonischen Potentials im Rahmen der DIA auf der einen und den lokalen Zustandsdichten des bipartiten Bienenwabengitters mit On-Site-Wechselwirkung auf der anderen Seite wurden Chern-, Band- und Mott-Isolator-Phasen identifiziert. Dabei wurden neben den bloßen Zustandsdichten auch das Verhalten ihrer Bandlücken und Bandbreiten bei Variation der Hubbard-Wechselwirkung untersucht.

Die an einzelne Gitterplätze angekoppelten zusätzlichen Badplätze tragen zur Identifikation der Topologie der Phase endliche On-Site-Potentiale. Im Regime großer Haldane-Massen konnte eine Zwischenphase zwischen dem wechselwirkungsfreien Isolator und dem Mott-Isolator, in dem die Doppelbesetzung eines Gitterplatzes mit Elektronen

verschiedener Spinorientierung zu viel Energie kostet, um Elektronenbewegung zu ermöglichen, gefunden werden. Diese Zwischenphase ist topologisch trivial, trägt also die Chern-Zahl $C = 0$. Die nicht-triviale topologische Natur der Zwischenphase in Ref. [62] konnte im Rahmen dieser Arbeit nicht reproduziert werden, da das verwendete Modell keine spontane Brechung der Spin-Symmetrie erlaubt. Die Chern-Zahlen wurden für einige Parameter-Konfigurationen des Haldane-Modells bei fixiertem komplexen Übernächst-Nachbar-Hüpfen bestimmt.

In einer Folgearbeit könnte ein fiktives Magnetfeld, ein sogenanntes Weiss-Feld, zur Detektierung von spontaner Spinsymmetrie-Brechung in die DIA oder eine andere Methode auf der Basis der SFT integriert werden, um die topologische Natur der entdeckten Zwischenphase genauer zu untersuchen. Unter dem Einfluss eines supraleitenden Paar-Potentials kann durch Cooper-Paarung auch effektiv eine anziehende Elektron-Elektron-Wechselwirkung dominieren, die durch einen attraktiven Wechselwirkungsterm im Hubbard-Hamilton-Operator beschrieben werden und in einer Folgearbeit untersucht werden könnte. Dieses Modell besitzt eine topologisch nicht-triviale superfluide Phase, die ebenfalls durch Wechselwirkungen induziert wird [58]. Durch spontane Brechung der Translationsinvarianz des Gitters wird bei anziehender Hubbard-Wechselwirkung des Weiteren eine unkonventionelle Kekulé-Phase der Supraleitung gefunden [64]. Durch die kürzliche experimentelle Realisierung einer „p-Wellen“-Supraleiter-Phase in Graphen, deren Signatur von der des Substrats, das einen „d-Wellen“-Supraleiter darstellt, unterschieden werden kann, kommt diesem Ansatz eine neue Relevanz zu [63].

Ein weiteres spannendes Feld der Vielteilchen-Theorie stellen Unordnungseffekte dar. Vielteilchen-Wellenfunktionen können durch Unordnung räumlich lokalisiert werden und repulsive Wechselwirkungen schwächen diese Lokalisierung wieder ab und sind eventuell in der Lage sie aufzulösen [65]. Im Gegensatz zu chiralen oder helikalen Randzuständen, die aufgrund ihrer topologischen Natur und der Anwesenheit diskreter Symmetrien für hinreichend schwache Unordnung vor Rückstreuung an Unreinheiten der Kristalloberfläche geschützt sind, also nicht lokalisieren können, ist dies im Bulk möglich. Die Lokalisierung von Vielteilchen-Zuständen könnte das Zusammenbrechen topologischer Phasen durch Wechselwirkungseffekte mindestens quantitativ beeinflussen. Auch ein qualitativ anderes physikalisches Bild ist vorstellbar, so wie Wechselwirkung die Leitfähigkeit in der eigentlich isolierenden lokalisierten Phase erhöht, indem sie Elektronen erlaubt zwischen Potentialminima des Unordnungspotentials von einem Systemrand zum anderen zu tunneln. Eine Unordnung in der Größenordnung der Haldane-Masse, die zur unterschiedlichen Gewichtung der A - und B -Untergitter des Bienenwabengitters führt, wird sicherlich Einfluss auf die topologischen Eigenschaften des Systems ausüben [66]. Das Zusammenspiel von Unordnung und Wechselwirkung könnte hier die Ausbildung neuer exotischer Phasen und topologischer Ordnung ermöglichen [67].

A Appendix

A.1 Parametrisierung des Haldane-Modells

Das Haldane-Modell wird gemäß Abbildung 2.4 parametrisiert. Die Verbindungsvektoren $\vec{\delta}_i$ nächster Nachbarn bestimmen die Gittervektoren

$$\vec{\delta}_{1/2} = \frac{1}{2} \left(1, \pm \sqrt{3} \right)^T \quad (\text{A.1a})$$

$$\vec{\delta}_3 = (-1, 0)^T \quad (\text{A.1b})$$

$$\vec{a}_1 = \vec{\delta}_1 - \vec{\delta}_3 \quad (\text{A.1c})$$

$$\vec{a}_2 = \vec{\delta}_2 - \vec{\delta}_3. \quad (\text{A.1d})$$

Mit isotropem Nächst-Nachbar-Hüpfen $t = 1$ liegen die beiden Dirac-Punkte K und K' bei den Punkten

$$\vec{K} = \frac{2\pi}{3} \left(1, 1/\sqrt{3} \right)^T \quad (\text{A.2a})$$

$$\vec{K}' = \frac{2\pi}{3} \left(1, -1/\sqrt{3} \right)^T \quad (\text{A.2b})$$

in der Brillouin-Zone.

A.2 Berechnung von lokalen Green-Funktionen und Zustandsdichten

Für einen generischen Haldane-Hamilton-Operator nimmt die Hamilton-Matrix in der Basis wie Gl. (3.16b) die Form

$$H_k = \begin{pmatrix} D_k & \xi_k \\ \xi_k^* & \tilde{D}_k \end{pmatrix} \quad (\text{A.3a})$$

mit $k = (k_a, k_b)$ und (A.3b)

$$D_k = M + t_2 \left[e^{i\phi} \left(e^{ik_a} + e^{-ik_b} + e^{-i(k_a - k_b)} \right) + e^{-i\phi} \left(e^{-ik_a} + e^{ik_b} + e^{i(k_a - k_b)} \right) \right] \quad (\text{A.3c})$$

$$\tilde{D}_k = -M + t_2 \left[e^{-i\phi} \left(e^{ik_a} + e^{-ik_b} + e^{-i(k_a - k_b)} \right) + e^{i\phi} \left(e^{-ik_a} + e^{ik_b} + e^{i(k_a - k_b)} \right) \right] \quad (\text{A.3d})$$

$$D_k \stackrel{\phi=\pi/2}{=} M + 2t_2 (\sin(k_a) + \sin(k_b) + \sin(k_a - k_b)) \quad (\text{A.3e})$$

$$D_k \stackrel{\phi=0}{=} M + 2t_2 (\cos(k_a) + \cos(k_b) + \cos(k_a - k_b)) \quad (\text{A.3f})$$

$$\xi_k = 1 + e^{ik_a} + e^{ik_b} \quad (\text{A.3g})$$

an. Die Eigenwerte g_k der Matrixdarstellung der Green-Funktion G_k nach Gl. (3.16b) bestimmen den Gitterbeitrag zum großkanonischen Potential gemäß Gl. (3.14d). Aus den Diagonalelementen kann die lokale Green-Funktion auf den beiden Plätzen der Einheitszelle berechnet werden. Im weiteren Vorgehen beschränken wir uns auf zwei Spezialfälle der komplexen Phase.

Fall 1: $\phi = \pi/2$, $M \geq 0$

Mit positiver Masse und fixiertem komplexen Phasenfaktor $e^{\pm i\phi} = \pm i$ besitzt die Hamilton-Matrix mit $\tilde{D}_k = -D_k$ eine neue Symmetrie und wir können die Green-Funktion bestimmen.

$$H_k = \begin{pmatrix} D_k & \xi_k \\ \xi_k^* & -D_k \end{pmatrix} \quad (\text{A.4a})$$

$$G_k(\omega) = \begin{pmatrix} \omega - \Sigma_A(\omega) - D_k & -\xi_k \\ -\xi_k^* & \omega - \Sigma_B(\omega) + D_k \end{pmatrix}^{-1} \quad (\text{A.4b})$$

$$= \begin{vmatrix} \omega - \Sigma_A(\omega) - D_k & -\xi_k \\ -\xi_k^* & \omega - \Sigma_B(\omega) + D_k \end{vmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \omega - \Sigma_B(\omega) + D_k & \xi_k \\ \xi_k^* & \omega - \Sigma_A(\omega) - D_k \end{pmatrix} \quad (\text{A.4c})$$

Die Eigenwerte $g_k(\omega)$ der Green-Funktion können durch die neuen Variablen $\bar{\Sigma}(\omega)$ und $\mathcal{M}(\omega)$ nach Gl. (4.3) ausgedrückt werden. Für die lokale Green-Funktion $G_{\text{loc}}^{A/B}(\omega)$ werden die Diagonaleinträge über alle k -Werte summiert.

$$G_{\text{loc}}^{A/B}(\omega) = \sum_{k,i} (G_k)_{ii} = \sum_k \frac{\omega \pm D_k - \Sigma_{B/A}(\omega)}{(\omega + D_k - \Sigma_B(\omega))(\omega - D_k - \Sigma_A(\omega)) - |\xi_k|^2} \quad (\text{A.5a})$$

$$g_k(\omega) = \left(\omega - \bar{\Sigma}(\omega) \pm \sqrt{(D_k + \mathcal{M}(\omega))^2 + |\xi_k|^2} \right)^{-1} \quad (\text{A.5b})$$

Fall 2: $\phi = 0$, $M = 0$

Im zweiten Fall reduzieren sich die komplexen Exponentialfunktionen in Gl. (A.3f) zu reellen Kosinus-Funktionen, die symmetrisch in k sind. Damit gilt nun für die

Diagonalelemente des Hamilton-Operators $\tilde{D}_k = D_k$ als vereinfachende Symmetrie. Analog zu Fall 1 berechnen wir die lokale Green-Funktion.

$$H_k = \begin{pmatrix} D_k & \xi_k \\ \xi_k^* & D_k \end{pmatrix} \quad (\text{A.6a})$$

$$G_k(\omega) = \begin{pmatrix} \omega - \Sigma_A(\omega) - D_k & -\xi_k \\ -\xi_k^* & \omega - \Sigma_B(\omega) - D_k \end{pmatrix}^{-1} \quad (\text{A.6b})$$

$$G_{\text{loc}}^{A/B}(\omega) = \sum_k \frac{\omega - D_k - \Sigma_{B/A}(\omega)}{(\omega - D_k - \Sigma_B(\omega))(\omega - D_k - \Sigma_A(\omega)) - |\xi_k|^2} \quad (\text{A.6c})$$

$$g_k(\omega) = \left(\omega - \bar{\Sigma}(\omega) - D_k \pm \sqrt{\mathcal{M}^2(\omega) + |\xi_k|^2} \right)^{-1} \quad (\text{A.6d})$$

In Abwesenheit von Wechselwirkung $\Sigma(\omega) = 0$, $\forall \omega$ finden wir in diesem Fall die Verschiebung der Pole der Green-Funktion des reinen Tight-Binding-Modells durch das Diagonalelement A_k .

$$G_{\text{loc}}^{A/B}(\omega) \stackrel{(2)}{=} \frac{1}{2} \sum_k \left(\frac{1}{\omega - D_k - \xi_k} + \frac{1}{\omega - D_k + \xi_k} \right) \quad (\text{A.7})$$

Ausgehend von den oben beschriebenen Gleichungen müssen Zustandsdichten in den meisten Fällen numerisch bestimmt werden. Dazu wird eine Taylor-Entwicklung des Nenners der Green-Funktion um seine Nullstellen ω_i herum durchgeführt. Für analytische Funktionen $\alpha(k, \omega), \beta(k, \omega)$ gilt

$$\rho(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_k \frac{\alpha(k, \omega)}{\beta(k, \omega)} \quad (\text{A.8a})$$

$$= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{k,i} \frac{\alpha(k, \omega)}{(\partial_\omega \beta(k, \omega_i)) (\omega - \omega_i) + \mathcal{O}((\omega - \omega_i)^2)} \quad (\text{A.8b})$$

mit einem impliziten infinitesimal positiven Imaginärteil der Frequenzen ω im Nenner, um Konvergenz und Kausalität zu gewährleisten, der zur besseren Übersicht nicht explizit hingeschrieben wird. Dieser hat jedoch einen Einfluss, so dass mit der Dirac-Identität

$$\frac{1}{\omega - a + i\delta} = \text{CH} \left[\frac{1}{\omega - a} \right] - i\pi \delta(\omega - a) \quad (\text{A.9})$$

die Zustandsdichte in der Form

$$\rho(\omega) = \sum_{k,i} \frac{\alpha(k, \omega_i)}{\partial_\omega \beta(k, \omega_i)} \delta(\omega - \omega_i(k)) \quad (\text{A.10})$$

formuliert werden kann, wobei „CH“ den Cauchy-Hauptwert bezeichnet. Zur numerischen Auswertung müssen also die Nullstellen der Funktion $\beta(k, \omega)$ und die Funktionswerte

$$\alpha(k, \omega_i) \stackrel{(1)}{=} \omega_i \pm D_k - \Sigma_{B/A}(\omega_i) \quad (\text{A.11a})$$

$$\partial_\omega \beta(k, \omega_i) \stackrel{(1)}{=} (\omega_i + D_k - \Sigma_B(\omega)) (1 - \partial_\omega \Sigma_A(\omega_i)) + (\omega_i - D_k - \Sigma_A(\omega_i)) (1 - \partial_\omega \Sigma_B(\omega_i)) \quad (\text{A.11b})$$

in den Nullstellen gefunden werden.

A.3 Potentiallandschaften mit $\phi = \pi/2$

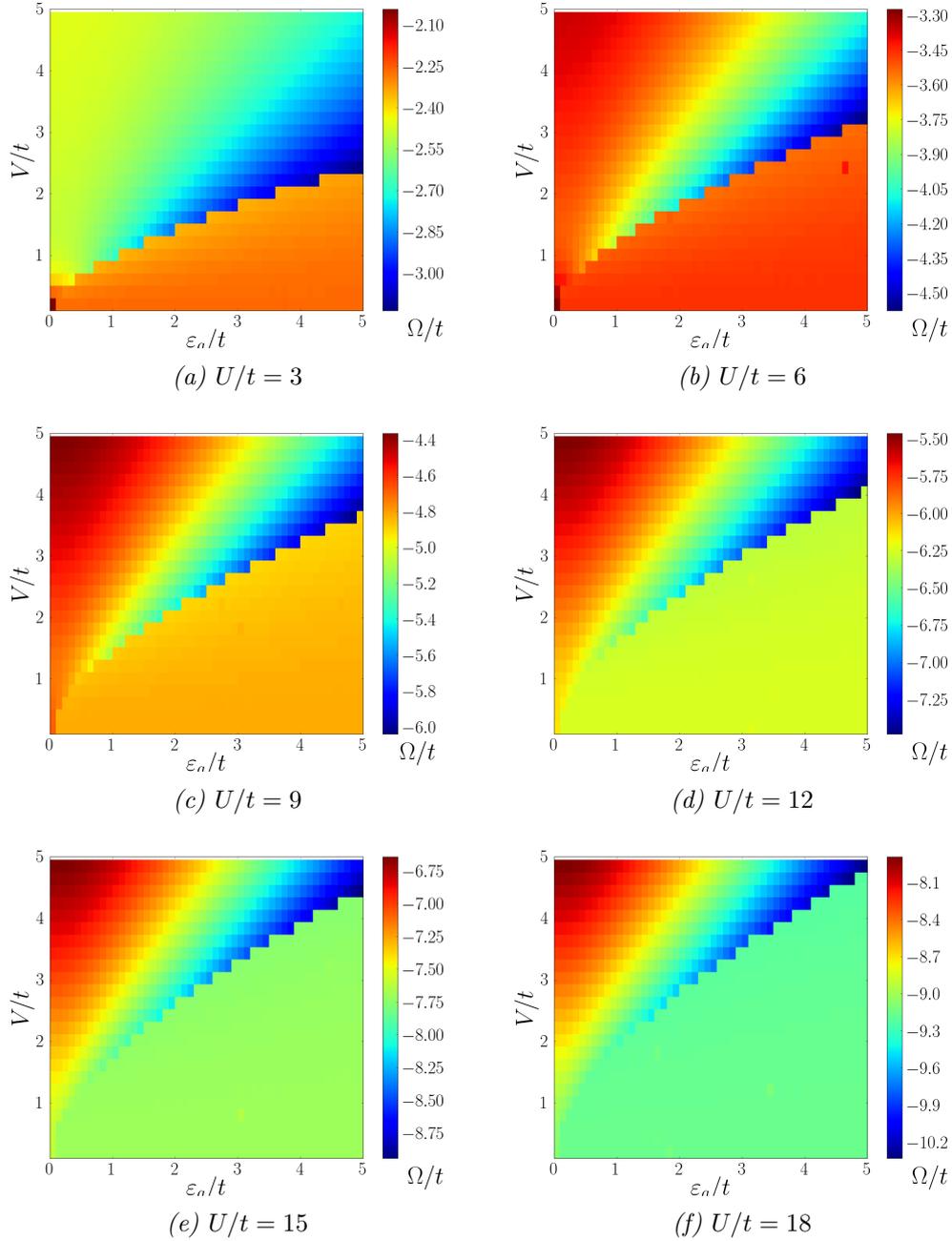


Abbildung A.1: Zur Erzeugung der gezeigten Potentiallandschaften wurde ein Cluster mit $n_s = 2$ und eine Haldane-Zustandsdichte mit $t_2/t = 0.2$, fixierter Phase $\phi = \pi/2$ und $M/t = 0$ verwendet.

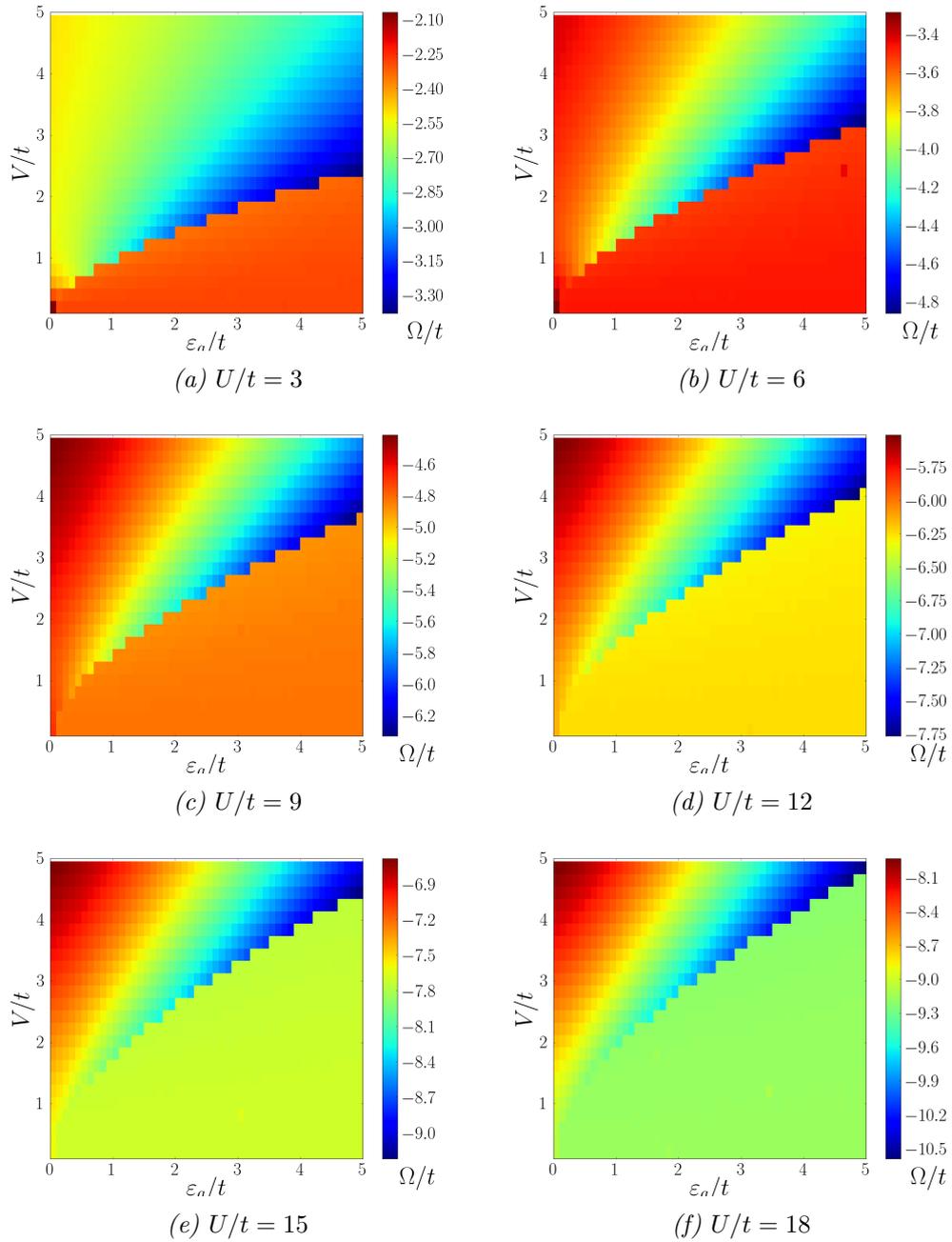


Abbildung A.2: Zur Erzeugung der gezeigten Potentiallandschaften wurde ein Cluster mit $n_s = 2$ und eine Haldane-Zustandsdichte mit $t_2/t = 0.2$, fixierter Phase $\phi = \pi/2$ und $M/t = 0.4$ verwendet.

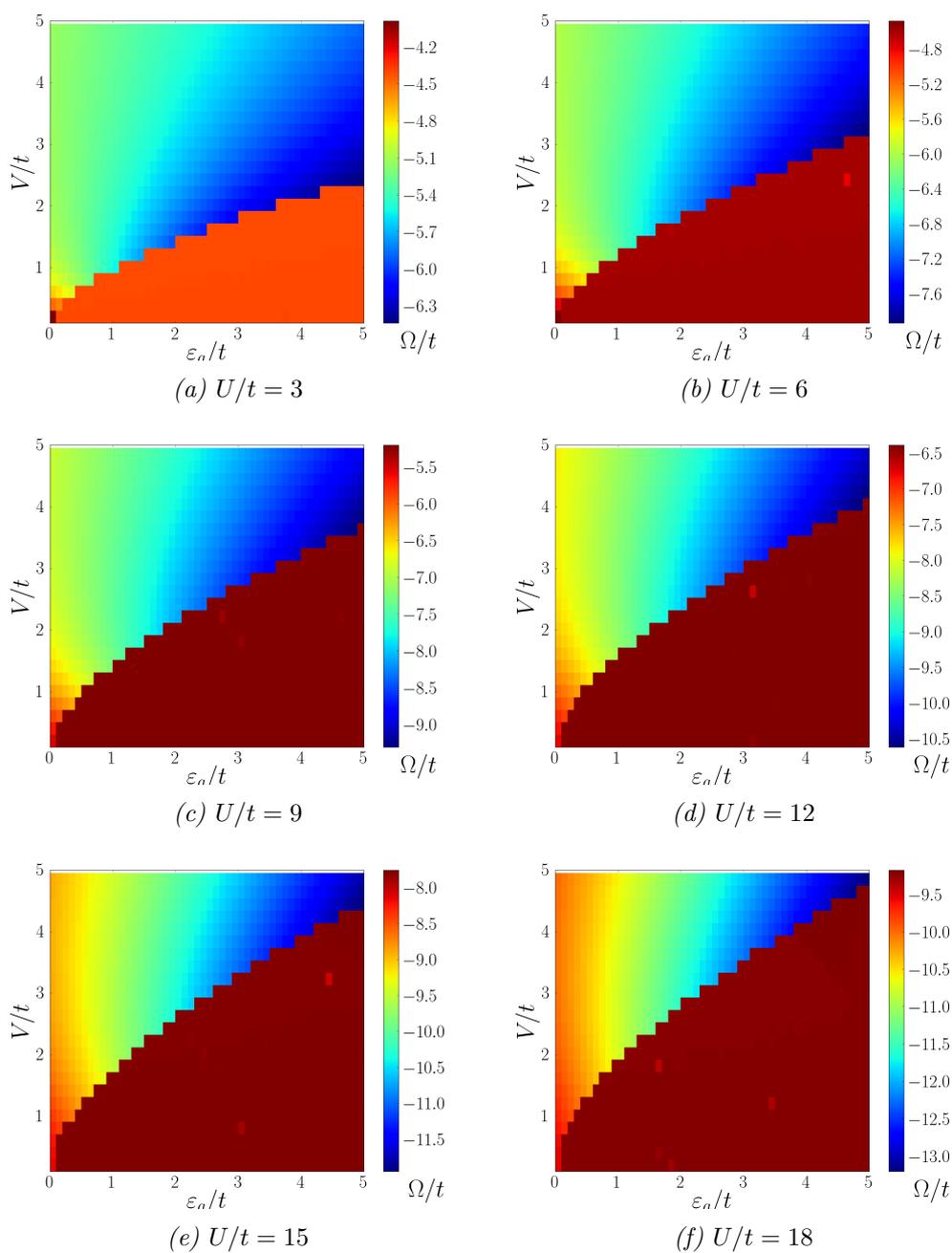


Abbildung A.3: Zur Erzeugung der gezeigten Potentiallandschaften wurde ein Cluster mit $n_s = 2$ und eine Haldane-Zustandsdichte mit $t_2/t = 0.2$, fixierter Phase $\phi = \pi/2$ und $M/t = 4.0$ verwendet.

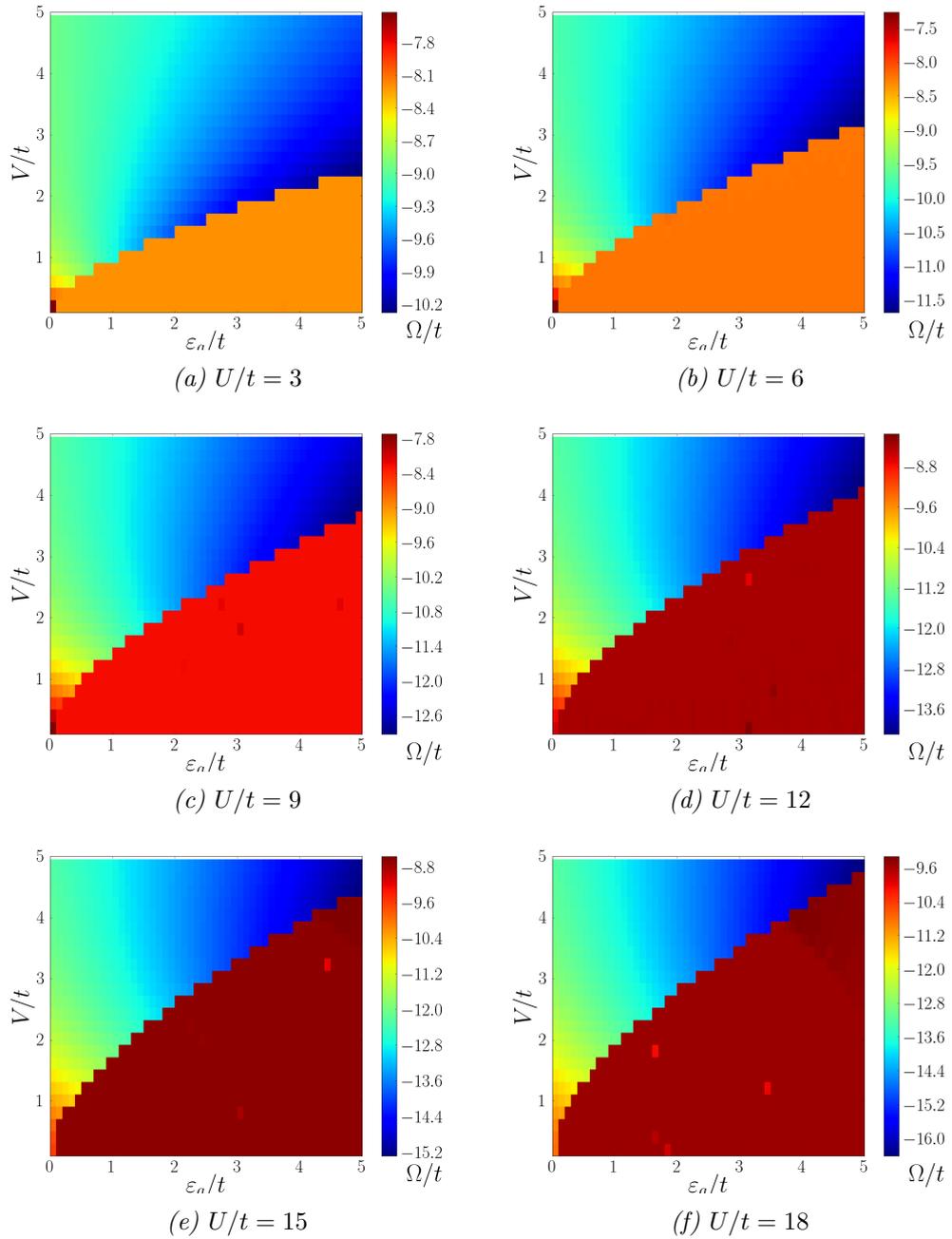


Abbildung A.4: Zur Erzeugung der gezeigten Potentiallandschaften wurde ein Cluster mit $n_s = 2$ und eine Haldane-Zustandsdichte mit $t_2/t = 0.2$, fixierter Phase $\phi = \pi/2$ und $M/t = 8.0$ verwendet.

Literaturverzeichnis

- [1] K.S. Novoselov *et al.* Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, **306**(666), 2004.
- [2] A. L. Ivanovskii. Graphene-based and graphene-like materials. *Russian Chemical Reviews*, **81**(7):571, 2012.
- [3] M. Ashton *et al.* Topology-scaling identification of layered solids and stable exfoliated 2d materials. *Physical Review Letters*, **118**(10):106101, 2017.
- [4] D. A. Abanin *et al.* Giant nonlocality near the Dirac point in graphene. *Science*, **332**(6027):328, 2011.
- [5] A. P. Schnyder *et al.* Classification of topological insulators and superconductors in three spatial dimensions. *Physical Review B*, **78**(19):195125, 2008.
- [6] A. Kitaev. Periodic table for topological insulators and superconductors. *AIP Conference Proceedings*, **1134**(1):22, 2009.
- [7] X.-G. Wen. Topological order: From long-range entangled quantum matter to a unified origin of light and electrons. *ISRN Condensed Matter Physics*, **2013**, 2013.
- [8] D. C. Tsui, H. L. Störmer, and A. C. Gossard. Zero-resistance state of two-dimensional electrons in a quantizing magnetic field. *Physical Review B*, **25**(2):1405, 1982.
- [9] R. B. Laughlin. Anomalous quantum Hall effect: an incompressible quantum fluid with fractionally charged excitations. *Physical Review Letters*, **50**(18):1395, 1983.
- [10] Y. Zhang, Y.-W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim. Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene. *Nature*, **438**(201):4, 2005.
- [11] A. Kitaev. Fault-tolerant quantum computation by anyons. *Annals of Physics*, **303**(1):2, 2003.
- [12] S.-H. Ho and F.-L. Lin. Anti-de sitter space as topological insulator and holography. *arXiv preprint arXiv:1205.4185*, 2012.
- [13] M. Z. Hasan and C. L. Kane. Colloquium: topological insulators. *Reviews of Modern Physics*, **82**(4):3045, 2010.
- [14] S. Raghu and F. D. M. Haldane. Analogs of quantum-Hall-effect edge states in photonic crystals. *Physical Review A*, **78**(3):033834, 2008.

- [15] B. A. Bernevig and T. L. Hughes. *Topological Insulators And Topological Superconductors*. Princeton University Press, 2013.
- [16] D. Hsieh *et al.* A topological Dirac insulator in a quantum spin Hall phase (experimental realization of a 3d topological insulator). *arXiv:0910.2420*, 2009.
- [17] N. H. Lindner, G. Refael, and V. Galitski. Floquet topological insulator in semiconductor quantum wells. *Nature Physics*, **7**, 2010.
- [18] T. Karzig, C.-E. Bardyn, N. H. Lindner, and G. Refael. Topological polaritons. *Physical Review X*, **5**(3):031001, 2015.
- [19] V. L. Ginzburg and L. D. Landau. On the theory of superconductivity. *Zh. eksp. teor. Fiz*, **20**(35):1064, 1950.
- [20] A. Kitaev. Anyons in an exactly solved model and beyond. *Annals of Physics*, **321**(1):2, 2006.
- [21] N. F. Mott. Metal-insulator transitions. *Contemporary Physics*, **14**(5):401, 1973.
- [22] P. Alexandroff. *Elementary concepts of topology*. Courier Corporation, 2012.
- [23] M. V. Berry. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. *Phys. R. Soc. London A*, **392**(45), 1984.
- [24] J. Hubbard. Electron correlations in narrow energy bands. *Proc. Roy. Soc. London A*, **276**(238), 1963.
- [25] A. Mielke. The Hubbard model and its properties. *Modeling and Simulation*, **5**:1, 2015.
- [26] M. C. Gutzwiller. Effect of correlation on the ferromagnetism of transition metals. *Physical Review Letters*, **10**(5):159, 1963.
- [27] J. Kanamori. Electron correlation and ferromagnetism of transition metals. *Progress of Theoretical Physics*, **30**(3):275, 1963.
- [28] S.-I. Tomonaga. Remarks on Bloch's method of sound waves applied to many-fermion problems. *Progress of Theoretical Physics*, **5**(4):544, 1950.
- [29] P. Fulde. *Electron correlations in molecules and solids*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [30] H. Bethe. Zur Theorie der Metalle. *Zeitschrift für Physik*, **71**(3-4):205, 1931.
- [31] M. Imada, A. Fujimori, and Y. Tokura. Metal-insulator transitions. *Reviews of Modern Physics*, **70**(4):1039, 1998.
- [32] W. Nolting. *Grundkurs Theoretische Physik 7: Viel-Teilchen-Theorie*. Springer-Verlag, 2014.

-
- [33] H. Bruus and K. Flensberg. *Many-body quantum theory in condensed matter physics: an introduction*. Oxford University Press, 2004.
- [34] G. Czycholl. *Theoretische Festkörperphysik: von den klassischen Modellen zu modernen Forschungsthemen*. Springer-Verlag, 2013.
- [35] P. W. Anderson. More is different. *Science, New Series*, **177**(4047):393, 1972.
- [36] M. Balzer, B. Kyung, D. Sénéchal, A.-M. S. Tremblay, and M. Potthoff. First-order mott transition at zero temperature in two dimensions: Variational plaquette study. *EPL (Europhysics Letters)*, **85**(1), 2009.
- [37] A. Liebsch. Correlated Dirac fermions on the honeycomb lattice studied within cluster dynamical mean field theory. *Physical Review B*, **83**(3), 2011.
- [38] W. Wu *et al.* Interacting Dirac fermions on honeycomb lattice. *Physical Review B*, **82**(24):245102, 2010.
- [39] P. W. Anderson. Localized magnetic states in metals. *Physical Review*, **124**(1):41, 1961.
- [40] M. Potthoff. Self-energy-function approach: Analytical results and the Mott-Hubbard transition. *The European Physical Journal B*, **36**:335, 2003.
- [41] W. Metzner and D. Vollhardt. Correlated lattice fermions in $d = \infty$ dimensions. *Physical review letters*, **62**(3):324, 1989.
- [42] A. Georges and G. Kotliar. Hubbard model in infinite dimensions. *Physical Review B*, **45**(12):6479, 1992.
- [43] V. Gurarie. Single-particle Green's functions and interacting topological insulators. *Physical Review B*, **83**(085426), 2011.
- [44] Z. Wang and B. Yan. Topological Hamiltonian as an exact tool for topological invariants. *Journal of Physics: Condensed Matter*, **25**(15), 2013.
- [45] M. König *et al.* Quantum spin Hall insulator state in HgTe quantum wells. *Science*, **318**(5851):766, 2007.
- [46] D. R. Yennie. Integral quantum Hall effect for nonspecialists. *Reviews of Modern Physics*, **59**(3):781, 1987.
- [47] F. D. M. Haldane. Model for a quantum Hall effect without Landau levels: Condensed-matter realization of the "parity anomaly". *Physical Review Letters*, **61**(18), 1988.
- [48] G. M. Graf and M. Porta. Bulk-edge correspondence for two-dimensional topological insulators. *Communications in Mathematical Physics*, **324**(3):851, 2013.

- [49] C. L. Kane and E. J. Mele. \mathbb{Z}_2 topological order and the quantum spin Hall effect. *Physical Review Letters*, **95**(146802), 2005.
- [50] M. Potthoff. Self-energy-function approach to systems of correlated electrons. *The European Physical Journal B*, **32**:429, 2003.
- [51] A. Avella and F. Mancini. *Strongly Correlated Systems: Theoretical Methods*, page 303. Springer, Berlin, Heidelberg, 2012.
- [52] D. Sénéchal. An introduction to quantum cluster methods. *arXiv preprint arXiv:0806.2690*, 2008.
- [53] Z. Osolin, T. Pruschke, R. Zitko. Fine structure of spectra in the antiferromagnetic phase of the Kondo lattice model. *Physical Review B*, **91**(075105), 2014.
- [54] T. Fukui, Y. Hatsugai and H. Suzuki. Chern numbers in discretized Brillouin zone: Efficient method of computing (spin) Hall conductances. *Journal of the Physical Society of Japan*, **74**(6):1674, 2005.
- [55] W. H. Press. *Numerical recipes 3rd edition: The art of scientific computing*. Cambridge university press, 2007.
- [56] M. Dowell and P. Jarratt. A modified regula falsi method for computing the root of an equation. *BIT Numerical Mathematics*, **11**(2):168, 1971.
- [57] V. S. Arun, R. Sohal, C. Hickey, and A. Paramekanti. Mean field study of the topological Haldane-Hubbard model of spin-1/2 fermions. *Physical Review B*, **93**(11):115110, 2016.
- [58] Y.-J. Wu, N. Li and S.-P. Kou. Chiral topological superfluids in the attractive Haldane-Hubbard model with opposite Zeeman energy at two sublattice sites. *The European Physical Journal B*, **88**(10):255, 2015.
- [59] Y.-C. Zhang, Z. Xu and S. Zhang. Topological superfluids and the BEC-BCS crossover in the attractive Haldane-Hubbard model. *Physical Review A*, **95**(4), 2017.
- [60] S. A. Jafari. Dynamical mean field study of the dirac liquid. *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems*, **68**(4):537, 2009.
- [61] M.-T. Tran and K. Kuroki. Finite-temperature semimetal-insulator transition on the honeycomb lattice. *Physical Review B*, **79**(12), 2009.
- [62] T. I. Vanhala *et al.* Topological phase transitions in the repulsively interacting Haldane-Hubbard model. *Physical Review Letters*, **116**(225305), 2016.
- [63] A. Di Bernardo, O. Millo, M. Barbone, H. Alpern, Y. Kalcheim, U. Sassi, A. K. Ott, D. De Fazio, D. Yoon, M. Amado, et al. P-wave triggered superconductivity in single-layer graphene on an electron-doped oxide superconductor. *Nature communications*, **8**:14024, 2017.

- [64] B. Roy and I. F. Herbut. Unconventional superconductivity on honeycomb lattice: Theory of Kekule order parameter. *Physical Review B*, **82**(3):035429, 2010.
- [65] S. Bera, H. Schomerus, F. Heidrich-Meisner, and J. H. Bardarson. Many-body localization characterized from a one-particle perspective. *Physical Review Letters*, **115**(4):046603, 2015.
- [66] M. Malki and G. S. Uhrig. Tunable edge states and their robustness towards disorder. *Physical Review B*, **95**(23):235118, 2017.
- [67] A. Chandran, V. Khemani, C. R. Laumann, and S. L. Sondhi. Many-body localization and symmetry-protected topological order. *Physical Review B*, **89**(14):144201, 2014.

Danksagung

Mein Dank gilt Prof. Dr. Götz S. Uhrig für die Bereitstellung des Themas dieser Arbeit und die geduldige Betreuung und Diskussion von Problemen. Auch danke ich Maik Malki für die jederzeitige Erreichbarkeit und Hilfsbereitschaft zu Fragen, die im Laufe der Arbeit aufgetreten sind, und der Betreuung des Schreibprozesses. Bei Leanna Splinter, Philip Bleiker und Gary Ferkinghoff bedanke ich mich für die angenehme Zusammenarbeit im Büro, am Whiteboard und für die Pflege der hiesigen Flora. Zuletzt danke ich Burak Cetinkaya für seine Hilfe bei der Korrektur von Rechtschreibung und Grammatik.

Eidesstattliche Versicherung

Name, Vorname

Matr.-Nr.

Ich versichere hiermit an Eides statt, dass ich die vorliegende Bachelorarbeit/Masterarbeit* mit dem Titel

selbstständig und ohne unzulässige fremde Hilfe erbracht habe. Ich habe keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt sowie wörtliche und sinngemäße Zitate kenntlich gemacht. Die Arbeit hat in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegen.

Ort, Datum

Unterschrift

*Nichtzutreffendes bitte streichen

Belehrung:

Wer vorsätzlich gegen eine die Täuschung über Prüfungsleistungen betreffende Regelung einer Hochschulprüfungsordnung verstößt, handelt ordnungswidrig. Die Ordnungswidrigkeit kann mit einer Geldbuße von bis zu 50.000,00 € geahndet werden. Zuständige Verwaltungsbehörde für die Verfolgung und Ahndung von Ordnungswidrigkeiten ist der Kanzler/die Kanzlerin der Technischen Universität Dortmund. Im Falle eines mehrfachen oder sonstigen schwerwiegenden Täuschungsversuches kann der Prüfling zudem exmatrikuliert werden. (§ 63 Abs. 5 Hochschulgesetz - HG -)

Die Abgabe einer falschen Versicherung an Eides statt wird mit Freiheitsstrafe bis zu 3 Jahren oder mit Geldstrafe bestraft.

Die Technische Universität Dortmund wird gfls. elektronische Vergleichswerkzeuge (wie z.B. die Software „turnitin“) zur Überprüfung von Ordnungswidrigkeiten in Prüfungsverfahren nutzen.

Die oben stehende Belehrung habe ich zur Kenntnis genommen:

Ort, Datum

Unterschrift