Модель Кейна–Меле

Евгений Аникин

29 марта 2016 г.

Пока что я не смог написать никаких формул для краевых состояний в этой модели (они получаются очень громоздкие). Но зато я нашёл уровни энергии для полосы конечной толщины численно. Картинка получилась такая же, как в статье.

1 Однородная решётка

Запишем гамильтониан из оригинальной статьи в менее компактном, но более удобном виде:

$$\begin{aligned} H = t \sum a_{mn}^{\dagger}(b_{mn} + b_{m,n-1} + b_{m+1,n-1}) + \text{h.c.} \\ + it_2 \sum a_{mn}^{\dagger}(a_{m,n+1} + a_{m-1,n} + a_{m+1,n-1}) + \text{h.c.} \\ - it_2 \sum b_{mn}^{\dagger}(b_{m,n+1} + b_{m-1,n} + b_{m+1,n-1}) + \text{h.c.} \end{aligned} \tag{1}$$

Здесь имеется в виду, что проекция спина s_z равна единице. Операторы a, b "сидят" в узлах шестиугольной решётки, базис которой мы выберем так:

$$\vec{x} = \begin{pmatrix} \frac{3}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}, \quad \vec{y} = \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix} \tag{2}$$

После преобразования Фурье гамильтониан будет задаваться матрицей

$$\begin{pmatrix} \xi & \eta e^{i\phi} \\ \eta e^{-i\phi} & -\xi \end{pmatrix}, \tag{3}$$

$$\xi = 2t_2(\sin px - \sin py - \sin p(x-y)) \tag{4}$$

$$\eta e^{i\phi} = t(1 + e^{-ipy} + e^{ip(x-y)}) \tag{5}$$

Энергия, таким образом,

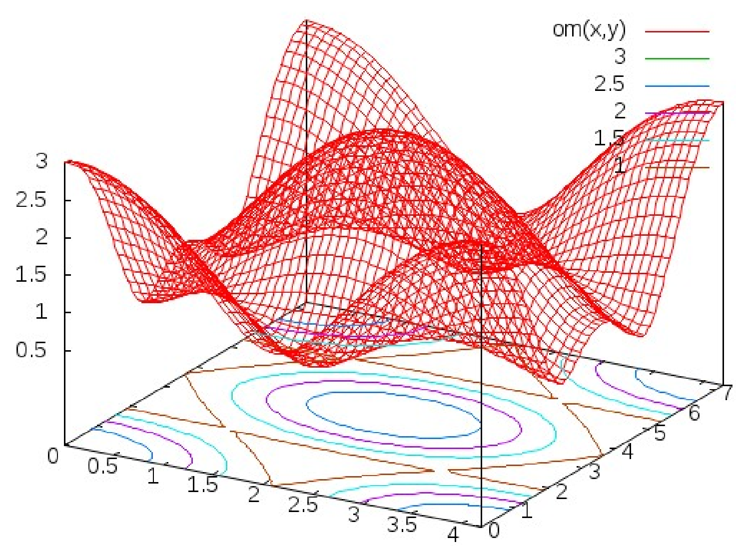
$$\begin{aligned} \epsilon_p^2 = \xi^2 + \eta^2 = \\ = 4t_2^2(\sin px - \sin py - \sin p(x-y))^2 + t^2|1 + e^{-ipy} + e^{ip(x-y)}|^2 \end{aligned} \tag{6}$$

После подстановки и страшных мучений эта формула может быть переписана так:

$$\epsilon_p^2 = \left(4t_2 \sin\frac{\sqrt{3}p_y a}{2}\cos\frac{3p_x a}{2} - 4t_2 \sin\frac{\sqrt{3}p_y a}{2}\cos\frac{\sqrt{3}p_y a}{2} + \frac{t^2}{2t_2}\cot\frac{\sqrt{3}p_y a}{2}\right)^2 - \frac{t^4}{4t_2^2}\cot^2\frac{\sqrt{3}p_y a}{2} + t^2\left(1 + 8\cos^2\frac{\sqrt{3}p_y a}{2}\right) = \\ = \left(a\cos\frac{3p_x a}{2} + b\right)^2 + c \quad (7)$$

В этой формуле a, b, c — функции только p_y, что, возможно, в дальнейшем пригодится при вычислении функций Грина в смешанном представлении (по p_x нужно будет интегрировать).

Очевидно, что спектр, определяемый формулой (6), имеет щель (см. иллюстрацию).



2 Полоса

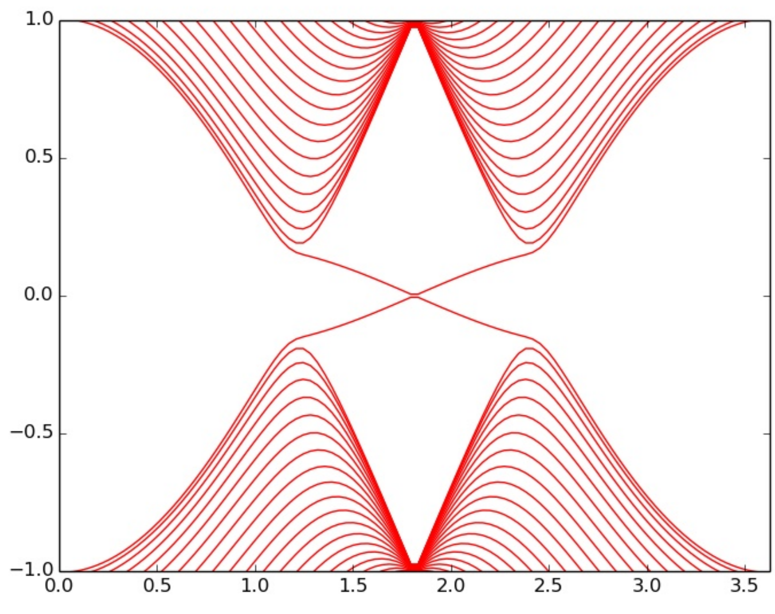
Чтобы исследовать полосу из атомов в этой модели, нужно сделать преобразование Фурье только по одной координате:

$$a_{mn} = \sum \frac{e^{i\sqrt{3}p_y n}}{\sqrt{N}} a_{m,p_y} \tag{8}$$

(и то же самое для b). Тогда гамильтониан запишется так:

$$\begin{aligned} H = \sum_{m,p_y} t(1 + e^{-i\sqrt{3}p_y a}) a_m^\dagger b_m + t e^{-i\sqrt{3}p_y a} a_m^\dagger b_{m+1} + \text{h.c.} \\ - 2t_2 \sin \sqrt{3} p_y a (a_m^\dagger a_m - b_m^\dagger b_m) \\ + i t_2 (1 - e^{i\sqrt{3}p_y a})(a_m^\dagger a_{m-1} - b_m^\dagger b_{m-1}) + \text{h.c} \end{aligned} \tag{9}$$

Для цепочки длиной в несколько десятков атомов собственные значения можно найти на компьютере. Для $t = 1$, $t_2 = 0.3$ (данные, которые приведены в статье) уровни энергии получаются такими:



Картинка в точности согласуется с аналогичной из статьи Кейна и Меле.