Краевые состояния в модели Кейна–Меле

Евгений Аникин

4 апреля 2016 г.

В предыдущем листке была получена формула для энергии в зависимости от квазиимпульса:

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

Матрица гамильтониана —

$$\begin{pmatrix} \xi & \eta e^{i\phi} \\ \eta e^{-i\phi} & -\xi \end{pmatrix}, \quad (2)$$

$$\xi = 2t_2(\sin px - \sin py - \sin p(x-y)) \quad (3)$$

$$\eta e^{i\phi} = t(1 + e^{-ipy} + e^{ip(x-y)}) \quad (4)$$

Это значит, что функции Грина в импульсном представлении —

$$G_0^R(\omega, A, A, \vec{p}) = \frac{\omega + \xi}{\omega^2 - \epsilon_p^2 + i\delta} \quad (5)$$

$$G_0^R(\omega, B, B, \vec{p}) = \frac{\omega - \xi}{\omega^2 - \epsilon_p^2 + i\delta} \quad (6)$$

$$G_0^R(\omega, A, B, \vec{p}) = \frac{\eta e^{-i\phi}}{\omega^2 - \epsilon_p^2 + i\delta} \quad (7)$$

$$G_0^R(\omega, B, A, \vec{p}) = G_0^R(\omega, A, B, -\vec{p}) \quad (8)$$

Теперь перейдём к рассмотрению границы цепочки. Пусть граница идёт вдоль вектора $\vec{y}$. Тогда уравнение Дайсона распадётся на независиме уравнения на функции $G(m,m',p_y)$. Границу можно реализовать, введя бесконечные добавки к энергии для атомов обоих типов вдоль одной линии.

$$G^R(m,s,m',s',p_y) = G_0^R(m,s,m',s'p_y) \\ + \Delta E G_0^R(m,s,0,A,p_y) G^R(0,A,m',s',p_y) \\ + \Delta E G_0^R(m,s,0,B,p_y) G^R(0,B,m',s',p_y) \quad (9)$$

Для бесконечного ΔE уравнение на связанные состояния —

$$\det \begin{pmatrix} G_0^R(0,A,0,A,p_y) & G_0^R(0,A,0,B,p_y) \\ G_0^R(0,B,0,A,p_y) & G_0^R(0,B,0,B,p_y) \end{pmatrix} = 0 \quad (10)$$

Таким образом, остаётся вычислить функции Грина, входящие в детерминант. Вычисляются они по таким формулам:

$$G_0^R(m,s,m',s',p_y) = \nu_x \int \frac{dp_x}{2\pi} e^{i\vec{p}\vec{x}(m-m')} G_R^0(s,s',p_x,p_y) \quad (11)$$

Этот интеграл равен сумме по полюсам в верхней полуплоскости, которые определяются уравнением

$$\omega^2 = (a\cos k + b)^2 + c \quad (12)$$