Некоторые сюжеты о топологических изоляторах

Anikin Evgeny, 128

29 марта 2017 г.

1 Точечная примесь

Гамильтониан простейшего топологического изолятора может быть записан в виде

$$H = \begin{pmatrix} \xi + \frac{1}{m}(2 - \cos p_x - \cos p_y) & 2t(\sin p_x - i \sin p_y) \\ 2t(\sin p_x + i \sin p_y) & -\xi - \frac{1}{m}(2 - \cos p_x - \cos p_y) \end{pmatrix} \tag{1}$$

Уровни энергии —

$$E_p^2 = (\xi + \frac{1}{m}(2 - \cos p_x - \cos p_y))^2 + 4t^2(\sin^2 p_x + \sin^2 p_y) \tag{2}$$

Если перейти из импульсного представления в координатное, то он превратится в гамильтониан сильной связи. Гамильтониан примеси тогда можно записать в виде

$$V = \Delta E(a_{00}^\dagger a_{00} + b_{00}^\dagger b_{00}) \tag{3}$$

1.1 Энергия связанных состояний

Связанные состояния даются уравнением

$$\det \left[\mathbb{1} - \Delta E \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \frac{\omega + \hat{H}}{\omega^2 - E_p^2} \right] = 1 \tag{4}$$

В последнем интеграле (от матрицы) недиагональные члены из–за симметрии обращаются в ноль. Таким образом, связанные состояния сводятся к уравнениям

$$\left[\begin{aligned} &\int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \frac{\omega + \xi + \frac{1}{m}(2 - \cos p_x - \cos p_y)}{\omega^2 - E_p^2} = \frac{1}{\Delta E}, \\ &\int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \frac{-\omega + \xi + \frac{1}{m}(2 - \cos p_x - \cos p_y)}{\omega^2 - E_p^2} = -\frac{1}{\Delta E}, \end{aligned} \right. \tag{5}$$

Эти интегралы можно взять приближённо в круге небольшого радиуса $p_{\max}$, если учесть, что при малых p спектр близок к коническому. После интегрирования получается

$$G(\omega, 0, 0)_{11} = -\frac{1}{8\pi} \frac{1}{m(4t^2 + \frac{\xi}{m})} \left[p_{\max}^2 + \left(2m(\omega + \xi) - \frac{\xi^2 - \omega^2}{4t^2 + \frac{\xi}{m}} \right) \log \left(1 + \frac{\left(4t^2 + \frac{\xi}{m}\right) p_{\max}^2}{\xi^2 - \omega^2} \right) \right] \tag{6}$$

Конечно, интегралы из (5) можно взять численно. Для $\xi, m, t = -0.03, 0.1, 0.5$ компоненты функции Грина изображены на графике.

Вычисление выше показывает, что происходит на краях этого графика. А именно, "хвосты" функций Грина растут логарифмически до бесконечности. Таким образом, для малых $\Delta E < 0$ появляется одно связанное состояние около зоны проводимости. При дальнейшем росте возмущения появляется состояние около валентной зоны.

1.2 Волновые функции

Волновые функции даются компонентами свободной функции Грина:

$$\Psi_{\alpha,i}(x) = G_0(x)_{\alpha i} \tag{7}$$

Здесь α — "спинорный" индекс, а i — индекс, соответствующий номеру волновой функции.

Функция Грина —

$$G_0(x) = \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \frac{\omega + \hat{H}}{\omega^2 - E_p^2} e^{ipx} \tag{8}$$

Их можно вычислить с помощью формального трюка. Определим новую функцию $F(x, y)$:

$$F(x, y) =\equiv \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \frac{e^{ip_x x + ip_y y}}{\omega^2 - E_p^2} \tag{9}$$

Несложно понять, что компоненты функций Грина выражаются (точными соотношениями) через $F(x, y)$. А именно,

$$\begin{aligned} G_{11} &= (\omega + \xi)F(x, y) - \frac{1}{m}(F(x+1, y) + F(x-1, y) + F(x, y+1) + F(x, y-1) - 4F(x, y)) \\ G_{21} &= -it(F(x+1, y) - F(x-1, y)) + t(F(x, y+1) - F(x, y-1)) \end{aligned} \tag{10}$$

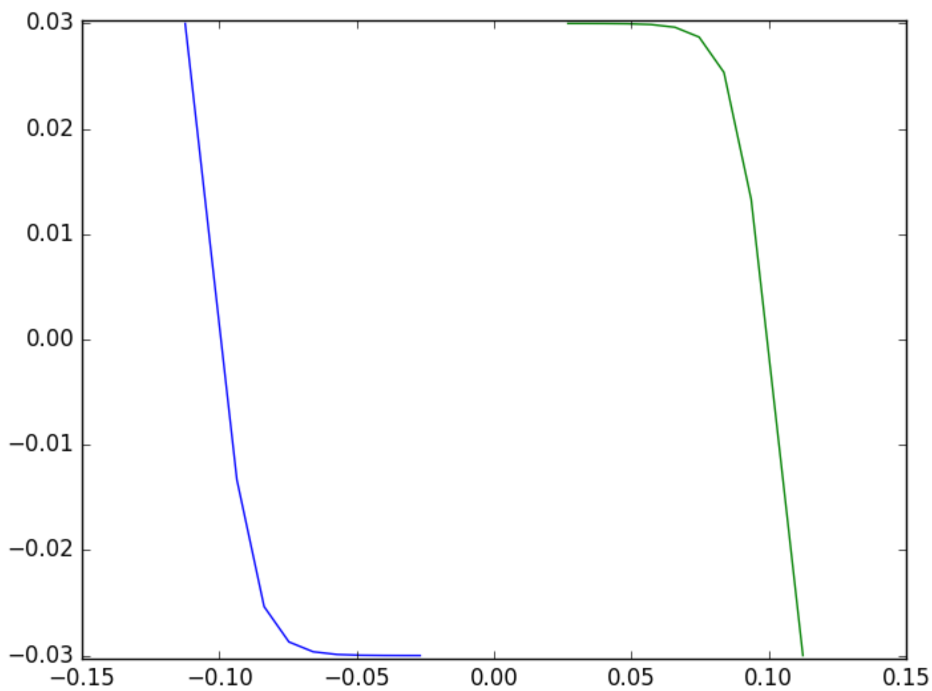

Рис. 1: На графике показаны уровни энергии связанных состояний на точечной примеси. По оси абсцисс отложена обратная глубина ямы, ΔE^{-1}. «Хвосты» обоих графиков должны быть продолжены до бесконечности, у синего графика — вправо снизу, у зелёного — влево сверху. Видно, что при бесконечной глубине ямы имеются два слабо связанных состояния.

С другой стороны, $F(x, y)$ может быть вычислена приближённо. Если разложить выражение в знаменателе около $p = 0$ и распространить интегрирование до ∞, то получится сходящийся и берущийся интеграл.

$$F(x,y) \approx -\int \frac{p\,dp\,d\cos\theta}{(2\pi)^2} \frac{e^{ipr\cos\theta}}{\xi^2 - \omega^2 - (4t^2 + \frac{\xi}{m})p^2} = -\frac{1}{2\pi}\frac{1}{4t^2 + \frac{\xi}{m}} K_0\left(\sqrt{\frac{\xi^2 - \omega^2}{4t^2 + \frac{\xi}{m}}} R\right) \tag{11}$$

Разности (10) можно аппроксимировать производными. Пользуясь тем, что $K_0(x)$ — решение модифицированного уравнения Бесселя, получим

$$\begin{aligned} G_{11} &= -\frac{1}{2\pi}\frac{1}{4t^2 + \frac{\xi}{m}} \left(\omega + \xi - \frac{1}{m}\frac{\xi^2 - \omega^2}{4t^2 + \frac{\xi}{m}}\right) K_0\left(\sqrt{\frac{\xi^2 - \omega^2}{4t^2 + \frac{\xi}{m}}} R\right) \\ G_{21} &= \frac{it}{\pi}\sqrt{\frac{\xi^2 - \omega^2}{(4t^2 + \frac{\xi}{m})^3}} K_0'\left(\sqrt{\frac{\xi^2 - \omega^2}{4t^2 + \frac{\xi}{m}}} R\right) e^{i\theta} \end{aligned} \tag{12}$$

2 Квантовая яма CdTe–HgTe–CdTe в модели сильной связи

В этом разделе будет рассмотрена модель сильной связи для квантовой ямы. В рамках модели найдены уровни размерного квантования. Результаты более–менее согласуются с расчётом в $k \cdot p$–приближении [1].

2.1 Модель однородного полупроводника

Модель представляет из себя кубическую решётку из атомов, на каждом из которых "сидят" состояния с p_x, p_y, p_z и s–орбиталями и двумя возможными проекцими спина.

Для написания спин–орбитального гамильтониана p–зоны необходимо перейти к состояниям с определённым полным моментом. Эти состояния выражаются через p_x, p_y, p_z орбитали через коэффициенты Клебша–Гордана:

$$\begin{aligned} \Psi_{\frac{3}{2},\frac{3}{2}} &= \frac{X + iY}{\sqrt{2}}\alpha \\ \Psi_{\frac{3}{2},\frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{1}{3}}\frac{X + iY}{\sqrt{2}}\beta - \sqrt{\frac{2}{3}}Z\alpha \\ \Psi_{\frac{3}{2},-\frac{1}{2}} &= -\sqrt{\frac{1}{3}}\frac{X - iY}{\sqrt{2}}\alpha - \sqrt{\frac{2}{3}}Z\beta \\ \Psi_{\frac{3}{2},-\frac{3}{2}} &= -\frac{X - iY}{\sqrt{2}}\beta \end{aligned} \tag{13}$$

$$\begin{aligned} \Psi_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{2}{3}}\frac{X + iY}{\sqrt{2}}\beta + \sqrt{\frac{1}{3}}Z\alpha \\ \Psi_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} &= -\sqrt{\frac{2}{3}}\frac{X - iY}{\sqrt{2}}\alpha - \sqrt{\frac{1}{3}}Z\beta \end{aligned} \tag{14}$$

Здесь X, Y, Z — атомные орбитали, α, β — состояния со спином вверх и вниз.

Спин–орбитальное взаимодействие приводит к расщеплению состояний с моментами $\frac{3}{2}$ и $\frac{1}{2}$. Состояниями с полным моментом $\frac{1}{2}$ можно пренебречь, если спин–орбитальное взаимодейтвие велико. Таким образом, в каждом узле решётки остаётся пара s–орбиталей, формирующая валентную зону, и четыре состояния с полным моментом $\frac{3}{2}$. Матричные элементы перекрытия между состояниями на соседних узлах выражаются через перекрытия s и p орбиталей с использованием выражений (13).

Определим матричные элементы $t_\parallel$ и $t_\perp$ для перекрытия соседних p–орбиталей, расположенных соответственно «вдоль» и «поперёк», $\frac{-iP}{2}$ для перекрытия s и p–орбитали и $-\frac{1}{2m_s}$ — для s–орбиталей. Через них полный гамильтониан сильной связи записывается в импульсном представлении в виде огромной матрицы 6×6.

$$H_{\text{full}} = \begin{pmatrix} H_c & T \\ T^\dagger & H_v \end{pmatrix}, \tag{15}$$

Матрицы H_c, T, H_v определены формулами (18)–(20), см. стр. 4.

Можно разложить гамильтониан по малым p. При разложении H_v получится гамильтониан Латтинжера [2]:

$$H_v = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\left\{-\left(\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma_2\right)k^2 + 2\gamma_2(k_x^2 J_x^2 + k_y^2 J_y^2 + k_z^2 J_z^2) + 4\gamma_3(k_x k_y J_x J_y + k_x k_z J_x J_z + k_y k_z J_y J_z)\right\} \tag{16}$$

где J_i — операторы момента для спина $\frac{3}{2}$, a — постоянная решётки, m — масса электрона,

$$\begin{gathered} \frac{\hbar^2}{2ma^2}\gamma_1 = \frac{1}{3}t_\parallel \\ \frac{\hbar^2}{2ma^2}\gamma_2 = \frac{1}{6}(t_\parallel - t_\perp) \\ \gamma_3 = 0 \end{gathered} \tag{17}$$

Разложение H_c и T тривиально. Всё это вместе воспроизводит модель Кейна, которую обычно получают в $k \cdot p$ приближении.

Коэффициенты перескока в сильной связи можно зафиксировать требованием, чтобы при малых p воспроизводился $k \cdot p$ гамильтониан с значениями параметров, известных из эксперимента [3].

2.2 Модель квантовой ямы

Квантовая яма представляет из себя последовательно расположенные слои CdTe, HgTe и CdTe. Это можно непосредственно реализовать как модель сильной связи с двумя типами узлов, которую затем несложно диагонализовать численно. Спектр этой модели состоит из густо расположенных двумерных зон, соответствующих объёмным состояниям CdTe, и двумерных зон размерного квантования HgTe, расположенных в запрещённой зоне CdTe.

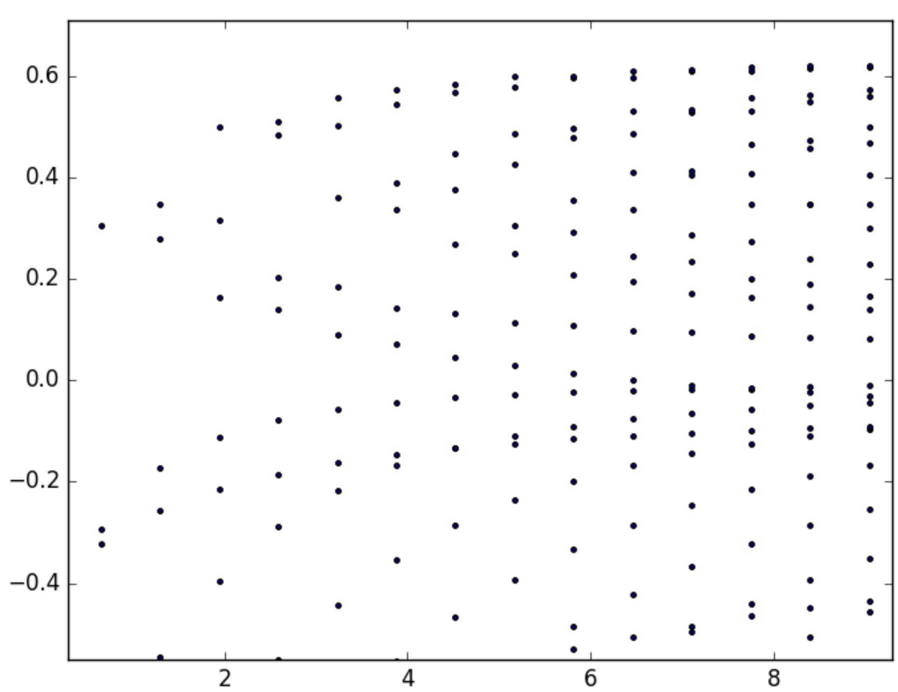

Рис. 2: На графике изображены уровни размерного квантования, полученные численной диагонализацией, для $k_x, k_y = 0$ в зависимости от толщины слоя HgTe, nm. Видно, что два уровня размерного пересекаются при $d \approx 7.5$.

$$H_c = (E_s + \frac{1}{m_s}(3 - \cos p_x - \cos p_y - \cos p_z))I_{2\times 2} \tag{18}$$

$$T = P\begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}}(\sin p_x + i\sin p_y) & \sqrt{\frac{2}{3}}\sin p_z & \frac{1}{\sqrt{6}}(\sin p_x - i\sin p_y) & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}}(\sin p_x + i\sin p_y) & \sqrt{\frac{2}{3}}\sin p_z & \frac{1}{\sqrt{2}}(\sin p_x - i\sin p_y), \end{pmatrix}, \tag{19}$$

$$H_v = \begin{pmatrix} (t_\parallel + t_\perp)(\cos p_x + \cos p_y) + 2t_\perp \cos p_z & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}(t_\parallel - t_\perp)(\cos p_x - \cos_{p_y}) & 0 \\ 0 & \left(\frac{t_\parallel}{3} + \frac{5t_\perp}{3}\right)(\cos p_x + \cos p_y) + \left(\frac{2t_\perp}{3} + \frac{4t_\parallel}{3}\right)\cos p_z & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}(t_\parallel - t_\perp)(\cos p_x - \cos_{p_y}) \\ -\frac{1}{\sqrt{3}}(t_\parallel - t_\perp)(\cos p_x - \cos_{p_y}) & 0 & \left(\frac{t_\parallel}{3} + \frac{5t_\perp}{3}\right)(\cos p_x + \cos p_y) + \left(\frac{2t_\perp}{3} + \frac{4t_\parallel}{3}\right)\cos p_z & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}(t_\parallel - t_\perp)(\cos p_x - \cos_{p_y}) & 0 & (t_\parallel + t_\perp)(\cos p_x + \cos p_y) + 2t_\perp \cos p_z \end{pmatrix} \tag{20}$$

3 Реконструкция края

В данном разделе рассматривается реконструкция края (аналогично [4]) в модели сильной связи (1) из [1].

Как известно, на границе топологического изолятора всегда возникают краевые состояния. Если T–симметрия не нарушена, то состояния с противоположными спинами и импульсами образуют крамерсовский дублет. Поэтому они не могут рассеиваться друг в друга ни на каком T–инвариантном возмущении.

При учёте электрон–электронного взаимодействия, однако, T–симметрия может спонтанно нарушиться. Когда такое нарушение происходит в объёме проводника, это называется магнетизмом Стонера. Для случая топологического изолятора же интересна ситуация, когда спонтанная намагниченность возникает около его края. Это приведёт к тому, что краевые состояния больше не будут топологически защищёнными. Могут, в частности, появиться дополнительные краевые моды, пересекающие запрещённую зону.

В дальнейшем будет использоваться приближение Хартри–Фока для точечного отталкивания:

$$V_{\mathrm{int}} = g \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \tag{21}$$

$$V_{\mathrm{Hartree-Fock}} = g \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \langle \hat{n}_{i\downarrow} \rangle + \langle \hat{n}_{i\uparrow} \rangle \hat{n}_{i\downarrow} - \langle \hat{n}_{i\uparrow} \rangle \langle \hat{n}_{i\downarrow} \rangle \tag{22}$$

Список литературы

[1] B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang. Quantum spin hall effect and topological phase transition in hgte quantum wells. *Science*, 314(5806):1757–1761, Dec 2006.

[2] J. M. Luttinger. Quantum theory of cyclotron resonance in semiconductors: General theory. *Physical Review*, 102(4):1030–1041, May 1956.

[3] E. G. Novik, A. Pfeuffer-Jeschke, T. Jungwirth, V. Latussek, C. R. Becker, G. Landwehr, H. Buhmann, and L. W. Molenkamp. Band structure of semimagnetic hg 1 — y mn y te quantum wells. *Physical Review B*, 72(3), Jul 2005.

[4] Jianhui Wang, Yigal Meir, and Yuval Gefen. Spontaneous breakdown of topological protection in two dimensions. *Physical Review Letters*, 118(4), Jan 2017.