

# Некоторые сюжеты о топологических изоляторах

Anikin Evgeny, 128

2 мая 2017 г.

## 1 Введение: Модель сильной связи (tight-binding model) для топологического изолятора

Простейший топологический изолятор описывается гамильтонианом [1]

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

Спектр этого гамильтониана несложно вычислить:

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

Как видно, гамильтониан описывает две симметричные зоны, щель между которыми равна  $2|\xi|$ . Оказывается, при  $\xi > 0$  гамильтониан описывает обычный изолятор, тогда как при  $\xi < 0$  — топологический.

Гамильтониан (1) задан во всей зоне Бриллюэна, поэтому, делая обратное преобразование Фурье, можно перейти к решётчному гамильтониану (также называемому гамильтонианом сильной связи или tight-binding model).

Решётчный гамильтониан выглядит так:

$$H_{\text{lattice}} = \sum_{mn} \left\{ a_{mn}^\dagger \left( \left( \xi + \frac{2}{m} \right) a_{mn} - \frac{1}{2m}(a_{m+1,n} + a_{m-1,n} + a_{m,n+1} + a_{m,n-1}) \right) \right. \\ \left. - ita_{mn}^\dagger (b_{m+1,n} - b_{m-1,n} - i(b_{m,n+1} - b_{m,n-1})) \right. \\ \left. - itb_{mn}^\dagger (a_{m+1,n} - a_{m-1,n} + i(a_{m,n+1} - a_{m,n-1})) \right. \\ \left. - b_{mn}^\dagger \left( \left( \xi + \frac{2}{m} \right) b_{mn} - \frac{1}{2m}(b_{m+1,n} + b_{m-1,n} + b_{m,n+1} + b_{m,n-1}) \right) \right\} \quad (3)$$

Здесь  $a_{mn}$ ,  $b_{mn}$  — операторы уничтожения состояний зоны проводимости и валентной зоны соответственно на узле  $(m, n)$ . Непосредственно обобщая этот решётчный гамильтониан, можно рассматривать решётку конечного размера, добавлять примеси и так далее.

## 2 Точечная примесь

### 2.1 Энергия связанных состояний

Гамильтониан примеси в модели сильной связи, описанной выше, можно записать в виде

$$V = \Delta E(a_{00}^\dagger a_{00} + b_{00}^\dagger b_{00}) \quad (4)$$

Связанные состояния даются уравнением

$$\det \left[ \mathbb{1} - \Delta E \int \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} \frac{\omega + \hat{H}}{\omega^2 - E_p^2} \right] = 1 \quad (5)$$

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

$$G(\omega, 0, 0)_{11} = \int \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} \frac{\omega + \xi + \frac{1}{m}(2 - \cos p_x - \cos p_y)}{\omega^2 - E_p^2} = \frac{1}{\Delta E}, \quad (6)$$

$$G(\omega, 0, 0)_{22} = \int \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} \frac{-\omega + \xi + \frac{1}{m}(2 - \cos p_x - \cos p_y)}{\omega^2 - E_p^2} = -\frac{1}{\Delta E}, \quad (7)$$

Эти интегралы можно взять приближённо в круге радиуса  $p_{\text{max}}$ , если учесть, что при малых  $p$  спектр близок к коническому. Можно считать, что  $p_{\text{max}} \sim 1$ . После интегрирования получается

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

Используя это выражение, можно решить уравнения (6) на связанные состояния. Оказывается, что для  $\xi < 0$  связанные состояния в запрещённой зоне существуют для сколь угодно глубокой ямы. Для  $\xi > 0$  это не так.

Будем решать уравнение (6), используя приближение (8). Сделаем предположение, что  $\omega = \xi + \delta\omega$ , где  $|\delta\omega| \ll |\xi|$  (ответ покажет, что это предположение почти всегда выполняется). Тогда можно выкинуть малые поправки из приближённого выражения для функции Грина (8). Получается уравнение

$$G(\omega, 0, 0)_{11} = -\frac{1}{8\pi} \frac{1}{m(4t^2 + \frac{\xi}{m})} \left[ p_{\max}^2 + 4m\xi \log \left( 1 + \frac{(4t^2 + \frac{\xi}{m}) p_{\max}^2}{-\xi \delta\omega} \right) \right] = \frac{1}{\Delta E} \quad (9)$$

Рассмотрим случай большого  $\Delta E$ . В этом случае очевидно, что при  $\xi > 0$  решений уравнения (9) нет, так как  $\delta\omega < 0$  и логарифм в формуле — большое положительное число. Для  $\xi < 0$ , напротив, логарифм приобретает знак минус, и получается решение

$$\delta\omega \approx \frac{(4t^2 + \frac{\xi}{m}) p_{\max}^2}{|\xi|} \exp \left\{ -\frac{p_{\max}^2}{4m|\xi|} - \frac{8\pi}{4m^2|\xi|\Delta E (4t^2 + \frac{\xi}{m})} \right\} \quad (10)$$

Уравнение (7) переходит в (6) при замене  $\omega \rightarrow -\omega$ ,  $\Delta E \rightarrow -\Delta E$ .

Интегралы из (6), (7) можно взять численно. Для  $\xi, m, t = -0.03, 0.1, 0.5$  на графике изображены найденные численно уровни энергии. Экспоненциальные хвосты на этом графике хорошо видны.

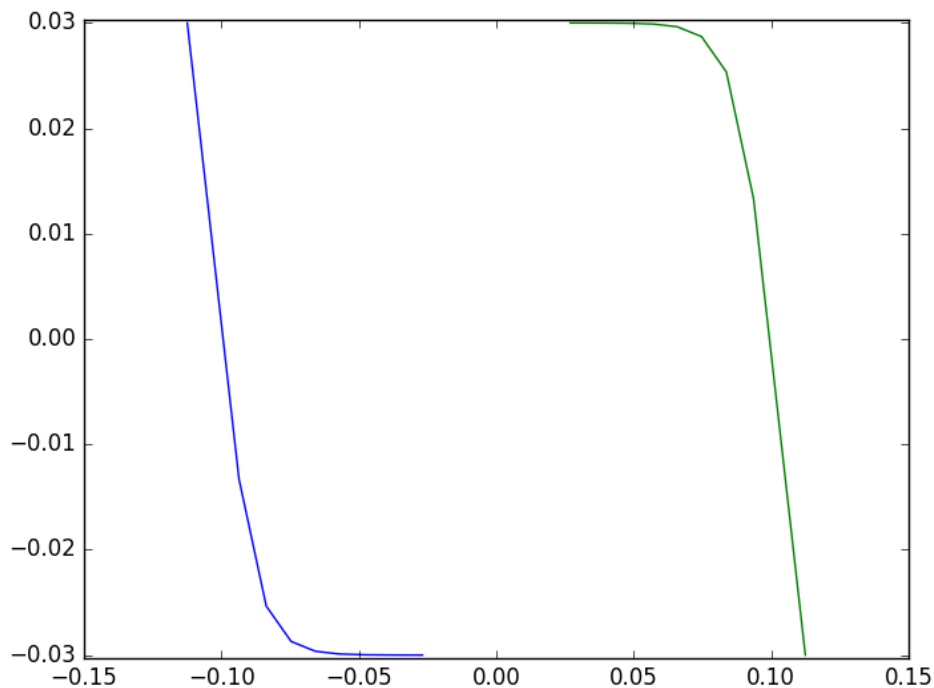


Рис. 1: На графике показаны уровни энергии связанных состояний на точечной примеси. По оси абсцисс отложена обратная глубина ямы,  $\Delta E^{-1}$ . «Хвосты» обоих графиков должны быть продолжены до бесконечности, у синего графика — вправо снизу, у зелёного — влево сверху. Видно, что при бесконечной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

## 2.2 Волновые функции

Волновые функции даются компонентами свободной функции Грина:

$$\Psi_{\alpha,i}(x) = G_0(x)_{\alpha i} \quad (11)$$

Здесь  $\alpha$  — «спинорный» индекс, а  $i$  — индекс, соответствующий номеру волновой функции.

Функция Грина —

$$G_0(x) = \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \frac{\omega + \hat{H}}{\omega^2 - E_p^2} e^{ipx} \quad (12)$$

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

$$F(x, y) \equiv \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \frac{e^{ipx + ip_y y}}{\omega^2 - E_p^2} \quad (13)$$

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

$$\begin{aligned} G_{11} &= (\omega + \xi)F(x, y) - \frac{1}{m}(F(x+1, y) + F(x-1, y) + F(x, y+1) + F(x, y-1) - 4F(x, y)) \\ G_{21} &= -it(F(x+1, y) - F(x-1, y)) + t(F(x, y+1) - F(x, y-1)) \end{aligned} \quad (14)$$

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

$$F(x, y) \approx - \int \frac{p dp d\cos\theta}{(2\pi)^2} \frac{e^{ipr \cos\theta}}{\xi^2 - \omega^2 - (4t^2 + \frac{\xi}{m})p^2} = -\frac{1}{2\pi} \frac{1}{4t^2 + \frac{\xi}{m}} K_0 \left( \sqrt{\frac{\xi^2 - \omega^2}{4t^2 + \frac{\xi}{m}}} R \right) \quad (15)$$

Разности (14) можно аппроксимировать производными. Пользуясь тем, что  $K_0(x)$  — решение модифицированного уравнения Бесселя, получим

$$\begin{aligned} G_{11} &= -\frac{1}{2\pi} \frac{1}{4t^2 + \frac{\xi}{m}} \left( \omega + \xi - \frac{1}{m} \frac{\xi^2 - \omega^2}{4t^2 + \frac{\xi}{m}} \right) K_0 \left( \sqrt{\frac{\xi^2 - \omega^2}{4t^2 + \frac{\xi}{m}}} R \right) \\ G_{21} &= \frac{it}{\pi} \sqrt{\frac{\xi^2 - \omega^2}{(4t^2 + \frac{\xi}{m})^3}} K'_0 \left( \sqrt{\frac{\xi^2 - \omega^2}{4t^2 + \frac{\xi}{m}}} R \right) e^{i\theta} \end{aligned} \quad (16)$$

### 3 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].

#### 3.1 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 проекциями 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:

$$\begin{aligned} \Psi_{\frac{3}{2}, \frac{3}{2}} &= \frac{X + iY}{\sqrt{2}} \alpha \\ \Psi_{\frac{3}{2}, \frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{1}{3}} \frac{X + iY}{\sqrt{2}} \beta - \sqrt{\frac{2}{3}} Z \alpha \\ \Psi_{\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}} &= -\sqrt{\frac{1}{3}} \frac{X - iY}{\sqrt{2}} \alpha - \sqrt{\frac{2}{3}} Z \beta \\ \Psi_{\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}} &= -\frac{X - iY}{\sqrt{2}} \beta \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} \Psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{X + iY}{\sqrt{2}} \beta + \sqrt{\frac{1}{3}} Z \alpha \\ \Psi_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} &= -\sqrt{\frac{2}{3}} \frac{X - iY}{\sqrt{2}} \alpha - \sqrt{\frac{1}{3}} Z \beta \end{aligned} \quad (18)$$

Здесь  $X, Y, Z$  — атомные орбитали,  $\alpha, \beta$  — 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 взаимодействие 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 (17).

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  $6 \times 6$ .

$$H_{\text{full}} = \begin{pmatrix} H_c & T \\ T^\dagger & H_v \end{pmatrix}, \quad (19)$$

Матрицы  $H_c$ ,  $T$ ,  $H_v$  определены формулами (22)–(24), см. стр. 4.

Можно разложить гамильтониан по малым  $p$ . При разложении  $H_v$  получится гамильтониан Латтинжера:

$$H_v = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \left\{ -\left( \gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma_2 \right) k^2 + 2\gamma_2 (k_x^2 J_x^2 + k_y^2 J_y^2 + k_z^2 J_z^2) + 4\gamma_3 (k_x k_y J_x J_y + k_x k_z J_x J_z + k_y k_z J_y J_z) \right\} \quad (20)$$

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

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2ma^2} \gamma_1 &= \frac{1}{3} t_{\parallel} \\ \frac{\hbar^2}{2ma^2} \gamma_2 &= \frac{1}{6} (t_{\parallel} - t_{\perp}) \\ \gamma_3 &= 0 \end{aligned} \quad (21)$$

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].

#### 3.2 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 диагонализировать 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.

$$H_c = (E_s + \frac{1}{m_s}(3 - \cos p_x - \cos p_y - \cos p_z))I_{2 \times 2} \quad (22)$$

$$T = P \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}}(\sin p_x + i \sin p_y) & \sqrt{\frac{2}{3}} \sin p_z & \frac{1}{\sqrt{6}}(\sin p_x - i \sin p_y) & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}}(\sin p_x + i \sin p_y) & \sqrt{\frac{2}{3}} \sin p_z & \frac{1}{\sqrt{2}}(\sin p_x - i \sin p_y) \end{pmatrix}, \quad (23)$$

$$H_v = \begin{pmatrix} (t_{\parallel} + t_{\perp})(\cos p_x + \cos p_y) + 2t_{\perp} \cos p_z & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}(t_{\parallel} - t_{\perp})(\cos p_x - \cos p_y) & 0 \\ 0 & \left(\frac{t_{\parallel}}{3} + \frac{5t_{\perp}}{3}\right)(\cos p_x + \cos p_y) + \left(\frac{2t_{\perp}}{3} + \frac{4t_{\parallel}}{3}\right) \cos p_z & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}(t_{\parallel} - t_{\perp})(\cos p_x - \cos p_y) \\ -\frac{1}{\sqrt{3}}(t_{\parallel} - t_{\perp})(\cos p_x - \cos p_y) & 0 & \left(\frac{t_{\parallel}}{3} + \frac{5t_{\perp}}{3}\right)(\cos p_x + \cos p_y) + \left(\frac{2t_{\perp}}{3} + \frac{4t_{\parallel}}{3}\right) \cos p_z & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}(t_{\parallel} - t_{\perp})(\cos p_x - \cos p_y) & 0 & (t_{\parallel} + t_{\perp})(\cos p_x + \cos p_y) + 2t_{\perp} \cos p_z \end{pmatrix} \quad (24)$$

Для двух уровней размерного квантования можно написать эффективный гамильтониан, учитывающий только их. Оказывается, что этот гамильтониан при малых  $k_x, k_y$  превращается в две копии (1), переходящие друг в друга при обращении времени.  $\xi$  из гамильтониана (1) — это расстояние между уровнями размерного квантования при  $k_x, k_y$ . Таким образом, в тот момент, когда два уровня размерного квантования пересекаются, эффективный гамильтониан для этих уровней становится гамильтонианом топологического изолятора. Согласно [1], это происходит при толщине ямы, равной 6.4 nm. У меня получилось, что критическая толщина равна  $\approx 7.5$  nm.

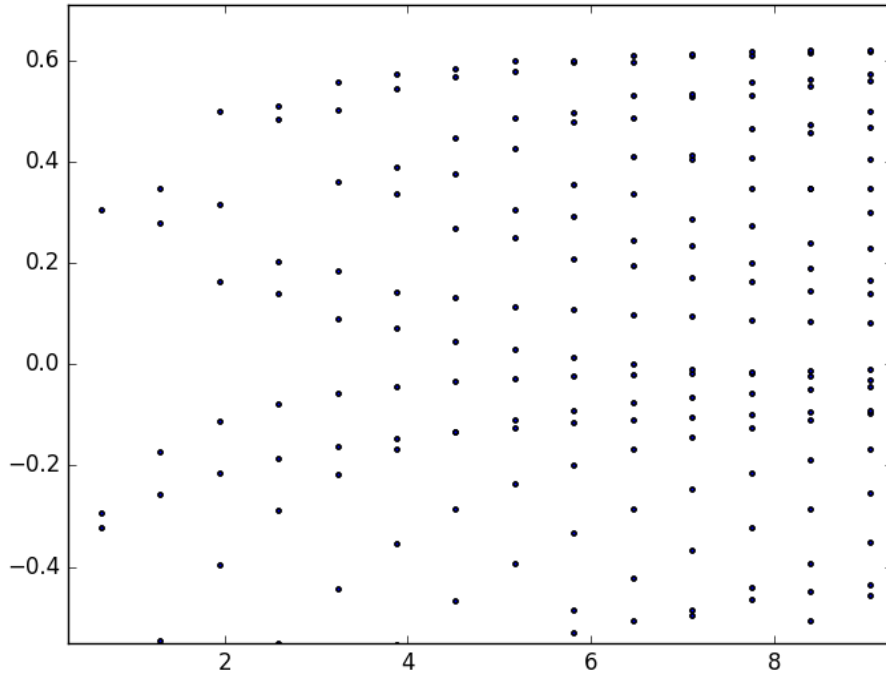


Рис. 2: На графике изображены уровни размерного квантования, полученные численной диагонализацией, для  $k_x, k_y = 0$  в зависимости от толщины слоя HgTe, nm. Видно, что два уровня размерного пересекаются при  $d \approx 7.5$ .

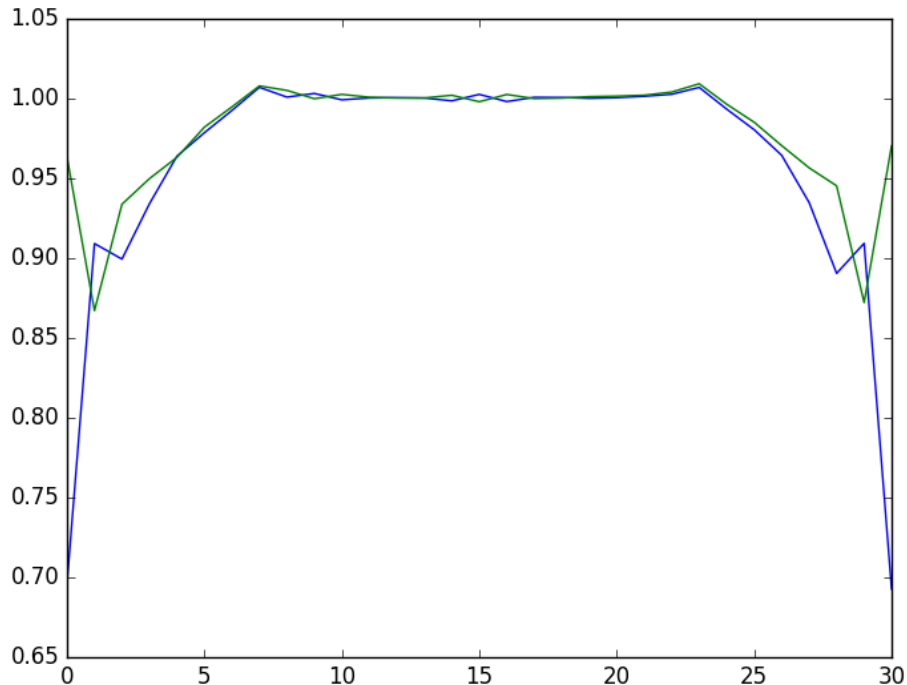


Рис. 3: Плотности электронов со спином вверх и вниз в самосогласованном решении для топологического изолятора с точечным отталкиванием

## 4 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. Для случая топологического изолятора интересна ситуация, когда спонтанная намагничённость возникает около края. Это приведёт к тому, что краевые состояния больше не будут топологически защищёнными. Могут, в частности, появиться дополнительные краевые моды, пересекающие запрещённую зону, и их набор может стать различным для спина вверх и спина вниз (именно это и называется реконструкцией).

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

$$V_{\text{int}} = g \sum_{i,j} \hat{n}_{ij\uparrow} \hat{n}_{ij\downarrow} \quad (25)$$

$$V_{\text{Hartree-Fock}} = g \sum_{i,j} \hat{n}_{ij\uparrow} \langle \hat{n}_{ij\downarrow} \rangle + \langle \hat{n}_{ij\uparrow} \rangle \hat{n}_{ij\downarrow} - \langle \hat{n}_{ij\uparrow} \rangle \langle \hat{n}_{ij\downarrow} \rangle \quad (26)$$

Здесь  $i, j$  — номера узлов решётки,  $\hat{n}_{ij}$  — оператор плотности на узле.

Согласно [4], для топологического изолятора с резкой границей реконструкции не происходит. Однако реконструкция возможна, если около края есть плавный отталкивательный потенциал вида

$$\hat{U} = U_0 \sum_{i < L_p, j} \left( 1 - \frac{i}{L} \right) \hat{n}_{ij} \quad (27)$$

Мы провели численную диагонализацию решёточного гамильтониана (1) с потенциалом (27) и точечным отталкиванием электронов со спином вниз и вверх в приближении Хартри-Фока. Рассматривалась полоска конечной ширины по оси  $Ox$  и с периодическими граничными условиями по  $Oy$ . При определённых значениях параметров действительно происходит реконструкция края. Результаты численной диагонализации изображены на рисунках 3, 4, 5. Видно, что уровень Ферми пересекает разное количество краевых мод для спина вверх и спина вниз.

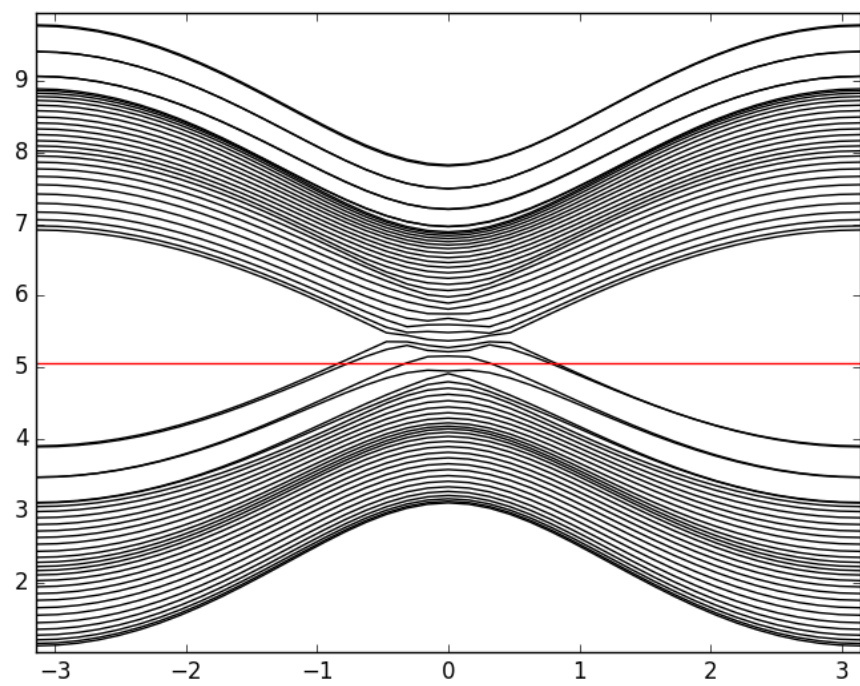


Рис. 4: Спектр электронов со спином вверх в самосогласованном потенциале. Красная линия означает уровень Ферми.

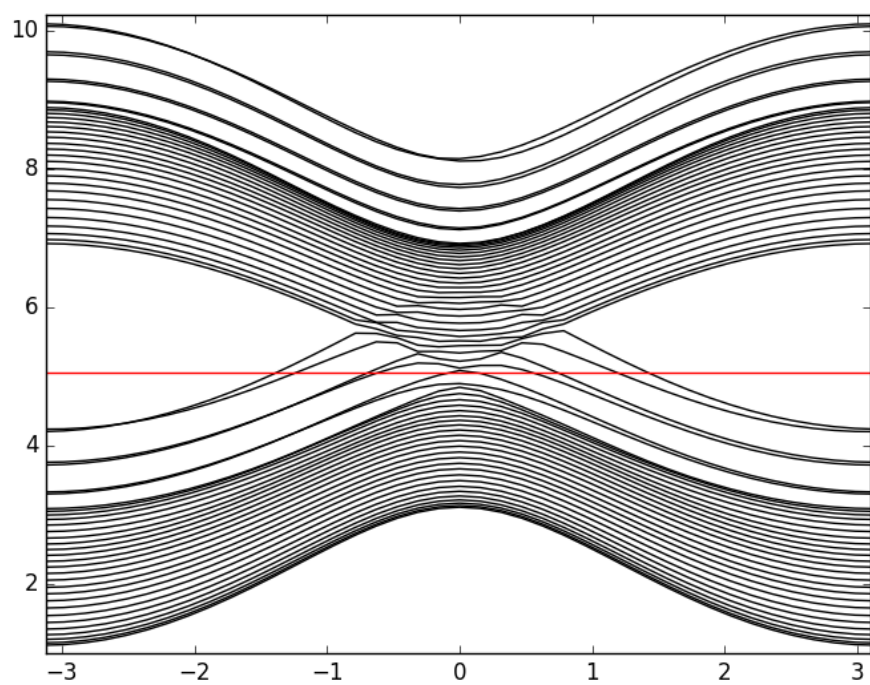


Рис. 5: Спектр электронов со спином вниз в самосогласованном потенциале. Красная линия означает уровень Ферми.

## 5 Локализация краевых состояний в присутствии магнитных примесей

На границе топологического изолятора возникают киральные краевые моды: электроны с разными спинами распространяются в противоположных направлениях. Рассеяние этих мод друг в друга под действием  $T$ -инвариантного возмущения невозможно, так как они образуют крамерсовский дублет. Магнитные примеси, однако, допускают возможность рассеяния. В связи с этим возникает вопрос о возможности андерсоновской локализации краевых состояний. В



## 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.