

МОСКОВСКИЙ ФИЗИКО–ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ  
КАФЕДРА ПРОБЛЕМ ФИЗИКИ И АСТРОФИЗИКИ

ОТЧЁТ О НАУЧНОЙ РАБОТЕ ЗА 1 СЕМЕСТР 2016–2017  
УЧЕБНОГО ГОДА

**Рассеяние краевых состояний в  
топологическом изоляторе в подходе  
сильной связи**

*Аникин Евгений*

научный руководитель  
чл.-к. РАН д. ф–м. н. П.И. АРСЕЕВ

18 декабря 2016 г.

# Содержание

1	Введение	2
2	Топологический инвариант	2
3	Случай двух зон	3
4	Простые примеры топологических изоляторов	3
5	Квантовая яма HgTe	4
6	Модель квантовой ямы в приближении сильной связи	4
7	Соответствие объём–граница	5

Потом напишу.

## 1 Введение

Топологические изоляторы — это кристаллы с особого рода зонной структурой. В отличие от обычных кристаллов, в них невозможно однозначно задать фазу функций Блоха во всей зоне Бриллюэна. Причина этого в том, что отличен от нуля топологический инвариант

$$N = \frac{1}{2\pi i} \int d^2k [\partial_i \langle u | \partial_j u \rangle - \partial_j \langle u | \partial_i u \rangle] \quad (1)$$

Кроме того, оказывается, что холловская проводимость, измеренная в квантах сопротивления, равна  $N$ .

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{2\pi\hbar} N \quad (2)$$

Та же самая картина наблюдается и в случае с эффектом Холла (зону Бриллюэна там заменяет магнитная зона Бриллюэна). Особенность топологических изоляторов в том, что в них наблюдается (спиновый) эффект Холла в отсутствие магнитного поля. Другая их особенность — в существовании бездиссипативных краевых состояний, что является следствием bulk–boundary correspondence.

Топологические изоляторы могут быть реализованы в системах со спин–орбитальным взаимодействием. Холловская проводимость неинвариантна по отношению к обращению времени, поэтому в системе с  $T$ –симметрией, каковой является кристалл при отсутствии магнитного поля, и при от отсутствии спин–орбитального взаимодействия  $N$  обязательно равно нулю. Действительно,  $T$ –симметрия в этом случае действует просто как комплексное сопряжение.

Иная ситуация возникает, когда есть спин–орбитальное взаимодействие. В этом случае  $N$  может быть отлично от нуля для каждой из компонент спина. Вследствие инвариантности по отношению к обращению времени для двух компонент спина  $N$  будет одинаково по модулю и противоположно по знаку.

## 2 Топологический инвариант

Пусть гамильтониан системы в импульсном представлении даётся некоторой матрицей  $H(k)$ , где  $k$  — волновой вектор зоны Бриллюэна. Для каждого  $k$  гамильтониан всегда можно диагонализировать и получить набор собственных векторов  $u_i(k)$ . Будем считать, что ни при каком  $k$  нет вырождения спектра (это соответствует случаю изолятора). Выбор собственного базиса неоднозначен: каждый вектор можно домножить на произвольную фазу. Очевидно, что в каждой окрестности  $k$  можно выбрать фазу каждого вектора так, чтобы она непрерывно зависела от  $k$ . Однако, вообще говоря, эту фазу может оказаться невозможно однозначно задать во всей зоне Бриллюэна, так как

Рассмотрим одну из ветвей спектра гамильтониана:  $u_i(\vec{k})$  (в дальнейшем опустим индекс  $i$ ). Предположим для простоты, что зону Бриллюэна можно разбить на две части  $A$  и  $B$ , в каждой из которых фазу  $u(k)$  можно определить однозначно. Назовём функции Блоха в этих двух частях  $u_a(k)$  и  $u_b(k)$ . На границе  $A$  и  $B$  (назовём её  $\gamma$ ) должно выполняться равенство

$$u_b(k) = e^{-i\phi(k)} u_a(k). \quad (3)$$

Определим число Черна, иначе называемое TKNN-инвариант (см. [1, 2]), как

$$N = \frac{1}{2\pi} \int_{\gamma} d\phi \quad (4)$$

С помощью простого вычисления  $N$  можно записать как интеграл по всей зоне Бриллюэна:

$$N = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} \langle u_a | \vec{\nabla}_k u_a \rangle - \langle u_b | \vec{\nabla}_k u_b \rangle d\vec{k} = \frac{1}{2\pi i} \int d^2k [\partial_i \langle u | \partial_j u \rangle - \partial_j \langle u | \partial_i u \rangle] \quad (5)$$

В последнем интеграле подынтегральное выражение калибровочно-инвариантно, что позволяет опустить индексы  $a, b$ .

### 3 Случай двух зон

В случае двух зон TKNN-инварианту можно придать особенно наглядную форму. Любой гамильтониан для двух зон можно записать в виде

$$H(k) = h_0(k) + \vec{h}(k) \vec{\sigma} = h_0(k) + |h| \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\phi} \\ \sin \theta e^{i\phi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \quad (6)$$

Его можно явно диагонализировать. Собственные векторы равны

$$\begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \\ \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (7)$$

и соответствуют энергиям

$$E(k) = h_0(k) \pm |\vec{h}| \quad (8)$$

Непосредственная подстановка (например, первого) собственного вектора в формулу (1) приводит к

$$N = \frac{1}{4\pi} \int \sin \theta d\theta d\phi \quad (9)$$

Таким образом,  $N$  равно количеству “оборотов”  $\vec{h}$  вокруг единичной сферы.

### 4 Простые примеры топологических изоляторов

Простейший гамильтониан с отличным от нуля TKNN-инвариантом (он рассматривался в [3], см. также [4]) —

$$H = \begin{pmatrix} \xi + \frac{1}{m}(2 - \cos p_x - \cos p_y) & 2t(\sin p_x - i \sin p_y) \\ 2t(\sin p_x + i \sin p_y) & -\xi - \frac{1}{m}(2 - \cos p_x - \cos p_y) \end{pmatrix} \quad (10)$$

Он возникает как эффективный гамильтониан, описывающий зону проводимости и зону тяжёлых дырок в более реалистичной модели полупроводника со спин-орбитальным взаимодействием (см. ниже).

Другой пример — модель Кейна-Меле [5], описывающая спин-орбитальное взаимодействие в графене. Она состоит из двух копий для противоположных проекций спина, причём у каждой из копий TKNN-инвариант отличен от нуля. Гамильтониан —

$$\hat{H} = \sum_{\langle ij \rangle \alpha} t c_{i\alpha}^\dagger c_{j\alpha} + \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle \alpha \beta} it_2 \nu_{ij} s_{\alpha\beta}^z c_{i\alpha}^\dagger c_{i\beta} \quad (11)$$

Суммирование в первом слагаемом идёт по соседним ячейкам, а во втором — по соседним ячейкам *одной подрешётки*, при этом  $\nu_{ij} = \pm 1$ , и его знак зависит от ориентации кратчайшего пути, соединяющего две ячейки.

В импульсном представлении для этой модели

$$\begin{aligned} H &= |h| \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\phi} \\ \sin \theta e^{i\phi} & -\cos \theta \end{pmatrix}, \\ |h| \cos \theta &= 2t_2(\sin px - \sin py - \sin p(x-y)), \\ |h| \sin \theta e^{i\phi} &= t(1 + e^{-ipy} + e^{ip(x-y)}) \end{aligned} \quad (12)$$

## 5 Квантовая яма HgTe

Квантовые ямы CdTe–HgTe–CdTe — первая экспериментальная реализация топологических изоляторов. Это было предсказано теоретически в [4] и обнаружено экспериментально в [6].

Спектр такой квантовой ямы можно найти в рамках  $k \cdot p$  метода. Спектры HgTe и CdTe нужно рассматривать в модели Кейна, явно учитывая  $s$ -зону проводимости и зоны лёгких и тяжёлых дырок. Гамильтониан модели Кейна —

$$\begin{aligned} H &= \begin{pmatrix} E_c + H_c & T \\ T^\dagger & E_v + H_v \end{pmatrix}, \\ H_c &= \frac{(2F+1)\hbar^2 k^2}{2m} I_{2 \times 2}, \\ H_v &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left( (\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma_2)k^2 - 2\gamma_2(\vec{k}\vec{J})^2 \right), \\ T &= \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}}Pk_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z & \frac{1}{\sqrt{6}}k_- & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}}k_+ & \frac{2}{3}Pk_z & \frac{1}{\sqrt{2}}Pk_- \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (13)$$

Здесь  $H_c$  — гамильтониан зоны проводимости,  $H_v$  — гамильтониан валентной зоны (гамильтониан Латтинжера),  $T$  — “взаимодействие” зон. Вид гамильтониана определяется из соображений симметрии, а численные значения констант известны из эксперимента (см. [7]).

Зонная структура HgTe — инверсная, то есть  $s$ -зона в нём лежит ниже  $p$ -зоны и фактически является валентной зоной. В CdTe, напротив, порядок зон нормальный,  $E_c > E_v$ . Это приводит к тому, что уровни размерного квантования, соответствующие электронам проводимости и тяжёлым дыркам, расположены по-разному в зависимости от толщины ямы. При некоторой критической толщине эти уровни пересекаются. Это позволяет написать эффективный гамильтониан, учитывающий только подуровни электронов проводимости и тяжёлых дырок. Оказывается, что он имеет вид (10)

## 6 Модель квантовой ямы в приближении сильной связи

Для описания квантовой ямы была написана модель сильной связи, описывающая валентную  $p$ -зону и  $s$ -зону проводимости. Мы рассмотрели плоскую квадратную решётку из атомов, на каждом из которых “сидят” состояния с  $p_x$ -,  $p_y$ -,  $p_z$ - и  $s$ -орбиталями и двумя возможными проекциями спина. В модели учитывались перекрытия орбиталей соседних атомов, а также

спин-орбитальное взаимодействие. Гамильтониан имеет вид

$$\begin{aligned}
H = \sum_{m,n} (E_s + 4t_s) s_{mn}^\dagger s_{mn} - t_s s_{mn}^\dagger (s_{m+1,n} + s_{m-1,n} + s_{m,n+1} + s_{m,n-1}) \\
+ t_{sp} s_{mn}^\dagger (-p_{m+1,n}^x + p_{m-1,n}^x - p_{m,n+1}^y + p_{m,n-1}^y) + \text{h.c.} \\
+ (p_{mn}^x)^\dagger (t_{\parallel} (p_{m+1,n}^x + p_{m-1,n}^x) + t_{\perp} (p_{m,n+1}^x + p_{m,n-1}^x)) \\
+ (p_{mn}^y)^\dagger (t_{\perp} (p_{m+1,n}^y + p_{m-1,n}^y) + t_{\parallel} (p_{m,n+1}^y + p_{m,n-1}^y)) \\
+ (p_{mn}^z)^\dagger t_3 (p_{m+1,n}^z + p_{m-1,n}^z + p_{m,n+1}^z + p_{m,n-1}^z) \\
- \frac{E_{SO}}{3} \begin{pmatrix} p_x^\dagger & p_y^\dagger & p_z^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & i & -1 \\ -i & 1 & i \\ -1 & -i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix} + \\
+ \text{всё то же самое с переворотом проекции спина} \quad (14)
\end{aligned}$$

Поясним происхождение члена, отвечающего за спин-орбитальное взаимодействие. Как хорошо известно, в атоме гамильтониан спин-орбитального взаимодействия имеет вид

$$H_{SO} = A(\vec{S}, \vec{L}) = \frac{A}{2}(J^2 - L^2 - S^2) \quad (15)$$

Если орбитальный момент фиксирован, то энергия определяется полным моментом. Таким образом, спин-орбитальное взаимодействие приводит к расщеплению состояний с моментами  $\frac{3}{2}$  и  $\frac{1}{2}$ . С помощью правил сложения моментов эти состояния можно выразить через  $p$ -орбитали:

$$\begin{aligned}
a_{\frac{3}{2}, \frac{3}{2}} &= \sqrt{\frac{1}{2}} (p_{x, \frac{1}{2}} - ip_{y, \frac{1}{2}}) \\
a_{\frac{3}{2}, \frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{1}{6}} (p_{x, -\frac{1}{2}} - ip_{y, -\frac{1}{2}}) + \sqrt{\frac{2}{3}} p_{z, \frac{1}{2}} \\
a_{\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{2}{3}} p_{z, -\frac{1}{2}} + \sqrt{\frac{1}{6}} (p_{x, \frac{1}{2}} + ip_{y, \frac{1}{2}}) \\
a_{\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}} &= \sqrt{\frac{1}{2}} (p_{x, -\frac{1}{2}} + ip_{y, -\frac{1}{2}})
\end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned}
a_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{1}{3}} (p_{x, -\frac{1}{2}} - ip_{y, -\frac{1}{2}}) - \sqrt{\frac{1}{3}} p_{z, \frac{1}{2}} \\
a_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} &= -\sqrt{\frac{1}{3}} p_{z, -\frac{1}{2}} + \sqrt{\frac{1}{3}} (p_{x, \frac{1}{2}} + ip_{y, \frac{1}{2}})
\end{aligned} \quad (17)$$

Тогда спин-орбитальный гамильтониан запишется так:

$$H_{\text{full}} = -\Delta E_{SO} (a_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^\dagger a_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} + a_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}^\dagger a_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}) \quad (18)$$

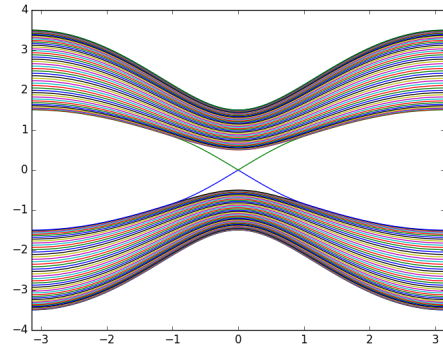
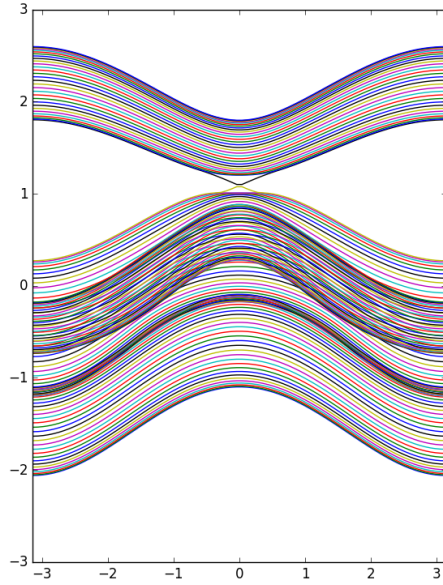
После простого преобразования получается последнее слагаемое в (14).

## 7 Соответствие объём-граница

Важнейшее свойство топологических изоляторов — наличие киральных краевых состояний. Оказывается, что на границе нормального и топологического изоляторов всегда существуют

краевые моды, причём разность числа мод, движущихся в одну сторону, и мод, движущихся в противоположную сторону, равна величине TKNN-инварианта.

Для всех упомянутых выше моделей это утверждение можно проверить, диагонализуя численно гамильтониан полосы, имеющей конечную толщину по одной из осей. На всех полученных спектрах видны уровни, пересекающие запрещённую зону. Именно они соответствуют краевым состояниям.



## Список литературы

- [1] Mahito Kohmoto. Topological invariant and the quantization of the hall conductance. *Annals of Physics*, 160(2):343–354, Apr 1985.
- [2] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs. Quantized hall conductance in a two-dimensional periodic potential. *Physical Review Letters*, 49(6):405–408, Aug 1982.
- [3] Xiao-Liang Qi, Yong-Shi Wu, and Shou-Cheng Zhang. Topological quantization of the spin hall effect in two-dimensional paramagnetic semiconductors. *Physical Review B*, 74(8), Aug 2006.
- [4] 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.
- [5] C. L. Kane and E. J. Mele. Quantum spin hall effect in graphene. *Physical Review Letters*, 95(22), Nov 2005.
- [6] M. Konig, S. Wiedmann, C. Brune, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang. Quantum spin hall insulator state in hgte quantum wells. *Science*, 318(5851):766–770, Nov 2007.
- [7] 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.