

МОСКОВСКИЙ ФИЗИКО–ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ
КАФЕДРА ПРОБЛЕМ ФИЗИКИ И АСТРОФИЗИКИ

ОТЧЁТ О НАУЧНОЙ РАБОТЕ ЗА 2 СЕМЕСТР 2015–2016
УЧЕБНОГО ГОДА

**Краевые состояния в системах со
спин–орбитальным взаимодействием в
подходе сильной связи**

Аникин Евгений

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

27 мая 2016 г.

Содержание

1	Введение	2
2	Подход сильной связи	2
3	Локализованные состояния в подходе сильной связи	3
4	Краевые состояния	6
5	Два примера одномерной цепочки	6
6	Спин–орбитальное взаимодействие	9
7	Модель Кейна–Меле	10
7.1	Краевые состояния	11
7.2	Отсутствие рассеяния для краевых состояний	14
8	Заключение	15

Аннотация

В данной работе изучаются свойства локализованных состояний в моделях сильной связи. На примере одномерных цепочек показано, что наличие краевых состояний сильно зависит как от внутренности цепочки, так от формы её края. Для модели Кейна–Меле аналитически найден закон дисперсии краевых состояний. Показано, что спин–орбитальное взаимодействие s -состояний приводит к гамильтониану Кейна–Меле и к взаимодействию Рашбы.

1 Введение

В статье Кейна и Меле [1] рассматривается модель плоской шестиугольной решётки со спин–орбитальным взаимодействием в приближении сильной связи. Эта модель реализует так называемый топологический изолятор: внутри решётки отличен от нуля топологический индекс [2], способный принимать значения 0, 1. Это приводит к тому, что на границе решётки должны образовываться краевые состояния, обладающие интересными свойствами. Во–первых, они фильтрованы по спину: невозможно изменить направление движения частицы, не изменив её спин. Во–вторых, никаким T -инвариантным возмущением невозможно заставить частицы в этих состояниях рассеяться назад.

Для того, чтобы разобраться в утверждениях этой статьи, нужно понять несколько вещей:

во–первых, каким образом строятся гамильтонианы сильной связи;

во–вторых, как в подходе сильной связи возникают локализованные состояния;

в–третьих, как включить в гамильтониан сильной связи спин–орбитальное взаимодействие и какое влияние это оказывает на локализованные состояния.

2 Подход сильной связи

Хорошо известно, что волновые функции частицы в периодическом потенциале имеют блоховский вид: $\psi = e^{ipx} u_p(x)$, где $u_p(x)$ — периодическая функция, а квазиимпульс p лежит в зоне Бриллюэна. Пока будем рассматривать только одну энергетическую зону. Тогда, если ввести операторы уничтожения a_p частиц в таких состояниях, то гамильтониан для электронов в решётке запишется так:

$$H = \sum_p \epsilon_p a_p^\dagger a_p, \quad (1)$$

В подходе сильной связи вводят новые операторы уничтожения a_n :

$$a_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_p e^{-ipR_n} a_p \quad (2)$$

Эти операторы соответствуют состояниям, волновые функции $w_n(x)$ которых называются функциями Ванье [3]. Функция Ванье локализована около n -го узла решётки, и, что важно, близка к атомной волновой функции, если перекрытие между атомными волновыми функциями не слишком велико.

Гамильтониан в подходе сильной связи записывается через эти операторы a_n .

$$H = \sum_k E a_k^\dagger a_k + \sum_{k \neq l} t_{k-l} a_k^\dagger a_l \quad (3)$$

Попутно получается выражение для энергетического спектра.

$$\epsilon_p = E + \sum_{n \neq 0} t_n e^{ipR_n} \quad (4)$$

Коэффициенты E, t_n — это просто коэффициенты фурье-разложения функции ϵ_p . Известно, что эти коэффициенты быстро убывают у для любой разумной функции. Следовательно, при написании гамильтониана типа (3) можно ограничиться только несколькими первыми членами.

В подходе сильной связи очень удобно рассматривать такие системы, у которых нарушена пространственная однородность. В качестве такой неоднородности может выступить примесный атом либо граница кристалла. Оба эти случая будут рассмотрены ниже.

3 Локализованные состояния в подходе сильной связи

Рассмотрим очень простую ситуацию: пусть в решётке, описываемой гамильтонианом (3), есть единственная примесь. Её проще всего описать возмущением следующего вида:

$$V = \Delta E a_0^\dagger a_0 \quad (5)$$

Оказывается, что около такой примеси возникнет локализованное состояние.

Наиболее удобно искать энергию этого состояния и волновую функцию, найдя запаздывающую функцию Грина для этого гамильтониана. Энергия состояния, как хорошо известно, будет определяться полюсом функции Грина (см. [4])

Нетрудно также получить, что функция Грина даётся выражением

$$G^R(\omega, m, n) = \sum_{\lambda} \psi_{\lambda}(m) \psi_{\lambda}^*(n) \frac{1}{\omega - E_{\lambda} + i\delta} \quad (6)$$

(Здесь ведётся суммирование по всем состояниям). Отсюда можно легко найти волновую функцию локализованного состояния:

$$\text{res } G^R(\omega, m, n)|_{\omega=E_{\lambda}} = \psi_{\lambda}(m)^* \psi_{\lambda}(n) \quad (7)$$

Чтобы найти функцию Грина для гамильтониана с возмущением, нужна, разумеется, функция Грина однородной решётки. Она даётся формулой

$$G_0^R(\omega, m, n) = \frac{1}{N} \sum_p \frac{e^{-ip(R_m - R_n)}}{\omega - E_p + i\delta}. \quad (8)$$

Новая функция Грина может быть найдена из уравнения Дайсона. (Его можно получить в технике Келдыша [5], [6] сразу на запаздывающую функцию Грина, или перейти к запаздывающей от мацубаровской заменой $i\omega \rightarrow \omega + i\delta$.)

$$G^R(\omega_n, m, n) = G_0^R(\omega_n, m, n) + \Delta E G_0^R(\omega_n, m, 0) G^R(\omega_n, 0, n) \quad (9)$$

Решение этого уравнения —

$$G^R(\omega, m, n) = G_0^R(\omega, m, n) + \frac{\Delta E G_0^R(\omega, m, 0) G_0^R(\omega, 0, n)}{1 - \Delta E G_0^R(\omega, 0, 0)} \quad (10)$$

Полюса функции Грина даются уравнением

$$\Delta EG_0^R(\omega, 0, 0) = 1, \quad (11)$$

то есть

$$\frac{\Delta E}{N} \int \frac{\rho(\epsilon) d\epsilon}{\omega - \epsilon + i\delta} = 1 \quad (12)$$

Пользуясь формулой (7), получим выражение для волновой функции связанного состояния.

$$\psi_\Lambda(n) = \frac{G_0^R(E_\Lambda, n, 0)}{\sqrt{-\frac{\partial G_0^R}{\partial \omega}(E_\Lambda, 0, 0)}} \quad (13)$$

Приведём без вывода волновые функции в некоторых конкретных примерах.

Во-первых, в случае, когда E_Λ очень близко к краю зоны (например, нижнему), волновая функция связанного состояния даётся приближённой формулой

$$\psi_\Lambda(n) = \sqrt{\frac{p_0}{2\pi\nu}} \frac{e^{-p_0 R_n}}{R_n} \quad (14)$$

(ν — объём элементарной ячейки, $p_0^2 = -2mE_\Lambda$, m — эффективная масса. Энергия отсчитывается здесь от нижнего края зоны) Такая волновая функция сильно делокализована: она отлична от нуля не только на примесном атоме, но и на многих атомах вокруг примесного.

Во-вторых, в случае, когда p_0 велико, точнее, $p_0 \ll a^{-1}$, волновая функция — $\psi_\Lambda(0) \approx 1$, а $\psi_\Lambda(n) \approx \frac{t_n}{E_\Lambda}$, где t_n — коэффициенты из гамильтониана. Волновая функция оказывается сильно локализованной и отлична от нуля только на нескольких атомах.

Наконец, в случае одномерной цепочки, когда гамильтониан —

$$\hat{H} = \sum_n E a_n^\dagger a_n + t a_{n+1}^\dagger a + t a_{n-1}^\dagger a, \quad (15)$$

функция Грина может быть найдена точно. Ответ выглядит так:

$$G_0^R(\omega, m, n) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{e^{-ik(m-n)}}{\omega - E - 2t \cos k + i\delta} = \frac{e^{-(m-n)\kappa}}{2t \sinh \kappa}, \quad \cosh \kappa = \frac{\omega - E}{2t} \quad (16)$$

4 Краевые состояния

Рассмотрим одномерную цепочку (15) с возмущением (5) и устремим ΔE к бесконечности. Физически это означает добавление бесконечно высокой потенциальной стенки, в результате чего мы получаем две полуцепочки, не связанные между собой. Далее можно обычным способом искать локализованные состояния. (Они называются таммовскими, так как впервые были рассмотрены Таммом, см. [7], [8])

Разумеется, сказанное относится не только к цепочке (15), но и к любой другой модели сильной связи. Всегда можно ввести такое возмущение, которое разделит систему на две несвязанные части. Например, в случае плоскости возмущение должно быть примерно таким:

$$\hat{V} = \Delta E \sum_m a_{m,0}^\dagger a_{m,0}, \quad \Delta E \rightarrow \infty \quad (17)$$

Это означает, что мы добавляем целую линию примесных атомов с очень большой энергией.

В частном случае гамильтониана (15) функция Грина получается такой:

$$G^R(\omega, m, n) = G_0^R(\omega, m, n) - \frac{G_0^R(\omega, m, 0)G_0^R(\omega, 0, n)}{G_0^R(\omega, 0, 0)} = \frac{e^{-|m-n|\kappa} - e^{-|m|\kappa - |n|\kappa}}{2t \sinh \kappa} \quad (18)$$

Здесь нет локализованных состояний: у функции Грина нет изолированных полюсов. Локализованные состояния возникают в более сложных случаях, некоторые из которых будут рассмотрены ниже.

5 Два примера одномерной цепочки

Так как в самой простой цепочке локализованных состояний не оказалось, усложним цепочку. А именно, рассмотрим цепочку чередующихся атомов с разными свойствами.

Во-первых, можно рассмотреть цепочку, где все матричные элементы перехода между соседними атомами одинаковы, а энергии атомов различаются. Гамильтониан такой цепочки —

$$H = \sum_n \xi(a_n^\dagger a_n - b_n^\dagger b_n) + ta_n^\dagger(b_n + b_{n-1}) + ta_n(b_n^\dagger + b_{n-1}^\dagger) \quad (19)$$

Во-вторых, возможен случай, когда энергии атомов одинаковы, но, напротив, различаются матричные элементы. Гамильтониан в этом случае —

$$H = \sum_n t_1(a_n^\dagger b_n + a_n b_n^\dagger) + t_2(a_{n+1}^\dagger b_n + a_{n+1} b_n^\dagger) \quad (20)$$

Оказывается, что краевое состояние есть только у второй цепочки, причём его наличие зависит от типа последней связи в решётке.

Рассмотрим подробнее вторую цепочку. Без ограничения общности будем считать, что $t_1 > t_2 > 0$.

После преобразования Фурье гамильтониан примет вид

$$H = \sum_p (t_1 e^{-\frac{ipa}{2}} + t_2 e^{\frac{ipa}{2}}) a_p^\dagger b_p + (t_1 e^{\frac{ipa}{2}} + t_2 e^{-\frac{ipa}{2}}) a_p b_p^\dagger \quad (21)$$

Отсюда получаем энергетический спектр, содержащий две зоны.

$$E_p^{1,2} = \pm \epsilon_p = \pm |t_1 e^{\frac{ipa}{2}} + t_2 e^{-\frac{ipa}{2}}| = \pm \sqrt{t_1^2 + t_2^2 + 2t_1 t_2 \cos pa} \quad (22)$$

Введём обозначение Гамильтониан диагонализуеться преобразованием

$$\begin{pmatrix} a_p \\ b_p \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -e^{i\phi} \\ e^{-i\phi} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_p \\ y_p \end{pmatrix}, \quad (23)$$

$$e^{i\phi} = \frac{t_1 e^{-\frac{ipa}{2}} + t_2 e^{\frac{ipa}{2}}}{\sqrt{t_1^2 + t_2^2 + 2t_1 t_2 \cos pa}} \quad (24)$$

Отсюда получаются выражения для функций Грина в импульсном представлении:

$$G_0^R(\omega, p, A, A) = G_0^R(\omega, p, B, B) = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\omega - \epsilon_p + i\delta} + \frac{1}{\omega + \epsilon_p + i\delta} \right) \quad (25)$$

$$G_0^R(\omega, p, A, B) = \frac{1}{2} \left(\frac{e^{i\phi}}{\omega - \epsilon_p + i\delta} - \frac{e^{i\phi}}{\omega + \epsilon_p + i\delta} \right) \quad (26)$$

$$G_0^R(\omega, p, B, A) = \frac{1}{2} \left(\frac{e^{-i\phi}}{\omega - \epsilon_p + i\delta} - \frac{e^{-i\phi}}{\omega + \epsilon_p + i\delta} \right) \quad (27)$$

Здесь аргументы A, B соответствуют операторам a_p и b_p .

Чтобы рассмотреть половину цепочки, введём возмущение $V = \Delta E a_0^\dagger a_0$, где ΔE очень велико. Это приведёт к уже знакомому нам уравнению Дайсона. Его решение —

$$G^R(\omega, m, s, n, s') = G_0^R(\omega, m, s, n, s') - \frac{G_0^R(\omega, m, s, 0, A) G_0^R(\omega, 0, A, n, s')}{G_0^R(\omega, 0, A, 0, A)}, \quad s, s' = A, B \quad (28)$$

Уровни энергии даются, как видно, нулями функции $G_0^R(\omega, 0, A, 0, A)$, а волновая функция связанного состояния пропорциональна $G_0^R(\omega, m, s, 0, A)$.

В нашем случае, как нетрудно убедиться, этот уровень энергии — $E = 0$. Действительно, подставим $\omega = 0$ в (25). Получается

$$G_0^R(\omega, p, A, A) = -\frac{1}{2\epsilon_p} + \frac{1}{2\epsilon_p} = 0 \quad (29)$$

Отсюда следует, что функции Грина в узельном представлении, составленные из операторов a , обращаются в нуль для всех m, n , и, таким образом, волновая функция связанного состояния равна нулю во всех узлах a .

Волновая функция оказывается равной

$$\begin{aligned} \psi(n, A) &= 0, \\ \psi(n, B) &= \begin{cases} \sqrt{1 - \left(\frac{t_2}{t_1}\right)^2} (-1)^n \left(\frac{t_2}{t_1}\right)^n & \text{при } n \geq 0, \\ 0 & \text{при } n < 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (30)$$

Краевое состояние есть только у правой половины цепочки, у которой последнее перекрытие — t_2 , то есть маленькое.

Теперь рассмотрим цепочку с одинаковыми элементами перекрытия. Все вычисления для неё проводятся точно так же, поэтому просто приведём их результаты:

$$E_p^{1,2} = \pm \epsilon_p = \pm \sqrt{\xi^2 + 4t^2 \cos^2 \frac{pa}{2}} \quad (31)$$

$$\begin{aligned} G_0^R(\omega, p, A, A) &= \frac{\omega + \xi}{\omega^2 - \epsilon_p^2 + i\delta} \\ G_0^R(\omega, p, A, B) &= \frac{2t \cos pa}{\omega^2 - \epsilon_p^2 + i\delta} \\ G_0^R(\omega, p, B, B) &= \frac{\omega - \xi}{\omega^2 - \epsilon_p^2 + i\delta} \end{aligned} \quad (32)$$

Уровни энергии для системы с возмущением определяются уравнением $G_0^R(\omega, 0, A, 0, A) = 0$, или

$$0 = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{\omega + \xi}{\omega^2 - \xi^2 - 2t^2 - 2t^2 \cos pa + i\delta} \quad (33)$$

Интеграл обращается в ноль при $\omega = -\xi$, на границе непрерывного спектра. Внутри запрещённой зоны, то есть в области $|\omega| < \xi$, интеграл строго отрицателен. Отсюда можно заключить, что в этом случае граничного состояния не существует: никаких новых полюсов у функции Грина не возникло.

6 Спин–орбитальное взаимодействие

Модель Кейна–Меле, которую мы рассмотрим ниже, описывает спин–орбитальное взаимодействие. В связи с этим возникает вопрос, как явно построить гамильтониан сильной связи из спин–орбитального гамильтониана. Будем исходить из того, что изначально электроны в атомах находятся в s -состояниях, а перекрытие атомных орбиталей мало. Тогда в приближении сильной связи считается, что $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0$ (ψ_1, ψ_2 — орбитали разных атомов), а отличны от нуля только матричные элементы $\langle \psi_1 | \hat{H} | \psi_2 \rangle$. Оказывается, что симметрия накладывает на них жёсткие ограничения.

Гамильтониан спин–орбитального взаимодействия выглядит так:

$$\hat{V}_{SO} = \frac{1}{4m^2c^2} \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} U \times \vec{p} \quad (34)$$

Матричные элементы V_{SO} —

$$\langle \psi_1 | \hat{V}_{SO} | \psi_2 \rangle = \frac{-i}{4m^2c^2} \int d^3x \psi_{1\alpha}^* \vec{\sigma}_{\alpha\beta} \cdot \vec{\nabla} U \times \vec{\nabla} \psi_{2\beta} \quad (35)$$

Выясним, как ведут себя эти матричные элементы по отношению к симметрии относительно плоскости. Пусть при симметрии волновые функции ψ_1, ψ_2 переходят в себя. Тогда после пространственной замены переменных вектор

$$\vec{a}_{\alpha\beta} = \frac{-i}{4m^2c^2} \int d^3x \psi_{1\alpha}^* \vec{\nabla} U \times \vec{\nabla} \psi_{2\beta} \quad (36)$$

должен, с одной стороны, перейти в себя, с другой, — в симметричный относительно *нормали* к плоскости. Это значит, что $\vec{a} \propto \vec{n}$, и

$$\langle \psi_{1\alpha} | \hat{V}_{SO} | \psi_{2\beta} \rangle \propto \vec{\sigma}_{\alpha\beta} \cdot \vec{n} \quad (37)$$

Таким образом, если плоская решётка симметрична относительно плоскости себя самой, то членов, переворачивающих спин, нет. Если же плоскость симметрии перпендикулярна плоскости решётки, то

$$\langle \psi_{1\alpha} | \hat{V}_{SO} | \psi_{2\beta} \rangle \propto \vec{\sigma}_{\alpha\beta} \cdot \vec{z} \times \vec{d}, \quad (38)$$

где \vec{d} — вектор вдоль линии пересечения плоскостей, а \vec{z} — нормаль к решётке. Этот член в гамильтониане называется членом Рашбы (Rashba term, см. [9]) Из тех же соображений следует, что при преобразовании симметрии, оставляющем неизменной решётку, но перемещающем $\psi_{1,2}$, матричные элементы получают дополнительный знак — (проще всего сказать, что нормаль \vec{n} — псевдовектор). Наконец, можно добавить, что при поворотах матричные элементы должны переходить друг в друга без всяких изменений знака.

7 Модель Кейна–Меле

Модель Кейна–Меле — это плоская шестиугольная решётка со спин–орбитальным взаимодействием. Её гамильтониан —

$$\hat{H} = \sum_{\langle ij \rangle \alpha} t c_{i\alpha}^\dagger c_{j\alpha} + \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle \alpha \beta} it_2 \nu_{ij} s_{\alpha\beta}^z c_{i\alpha}^\dagger c_{j\beta} \quad (39)$$

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. Это наиболее просто показать на рисунке.

Модель Кейна–Меле удовлетворяет всем свойствам симметрии из предыдущего раздела. Более того, все модели шестиугольной решётки с этими симметриями будут отличаться от модели Кейна–Меле только наличием более “далёких” матричных элементов.

Части гамильтониана, отвечающие разным спинам, как уже было отмечено в предыдущем разделе, независимы. Запишем гамильтониан для $s = +1$ в менее компактном, но более удобном виде:

$$\begin{aligned} H = & t \sum a_{mn}^\dagger (b_{mn} + b_{m,n-1} + b_{m+1,n-1}) + \text{h.c.} \\ & + it_2 \sum a_{mn}^\dagger (a_{m,n+1} + a_{m-1,n} + a_{m+1,n-1}) + \text{h.c.} \\ & - it_2 \sum b_{mn}^\dagger (b_{m,n+1} + b_{m-1,n} + b_{m+1,n-1}) + \text{h.c.} \end{aligned} \quad (40)$$

Операторы a , b “сидят” в узлах шестиугольной решётки, базис которой выбран так:

$$\vec{x} = \begin{pmatrix} \frac{3}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}, \quad \vec{y} = \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix} \quad (41)$$

После преобразования Фурье гамильтониан будет задаваться матрицей

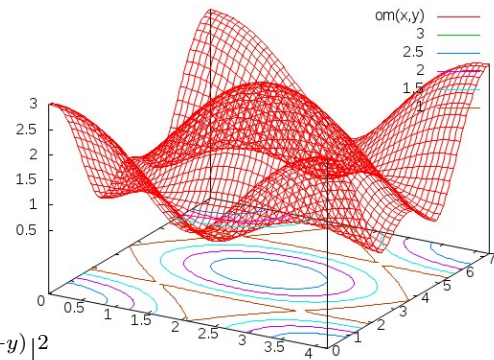
$$\begin{pmatrix} \xi & \eta e^{i\phi} \\ \eta e^{-i\phi} & -\xi \end{pmatrix}, \quad (42)$$

$$\xi = 2t_2(\sin px - \sin py - \sin p(x-y)) \quad (43)$$

$$\eta e^{i\phi} = t(1 + e^{-ipy} + e^{ip(x-y)}) \quad (44)$$

Энергия, таким образом,

$$\begin{aligned} \epsilon_p^2 &= \xi^2 + \eta^2 = \\ &= 4t_2^2(\sin px - \sin py - \sin p(x-y))^2 + t^2|1 + e^{-ipy} + e^{ip(x-y)}|^2 \end{aligned} \quad (45)$$



Спектр, определяемый формулой (45), изображён на рисунке.

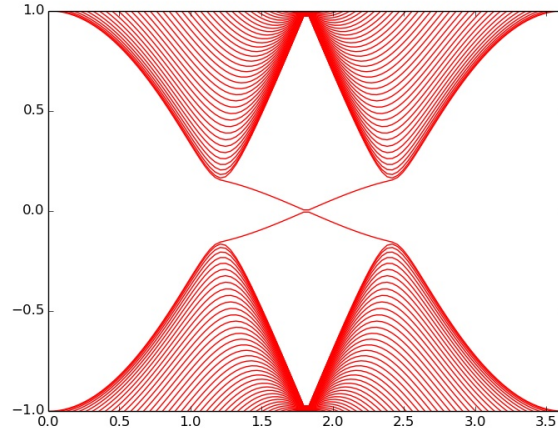
7.1 Краевые состояния

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

$$a_{mn} = \sum \frac{e^{i\sqrt{3}p_y n}}{\sqrt{N}} a_{m,p_y} \quad (46)$$

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

$$\begin{aligned} H = \sum_{m,p_y} t(1 + e^{-i\sqrt{3}p_y a}) a_m^\dagger b_m + t e^{-i\sqrt{3}p_y a} a_m^\dagger b_{m+1} + \text{h.c.} \\ - 2t_2 \sin \sqrt{3}p_y a (a_m^\dagger a_m - b_m^\dagger b_m) \\ + it_2(1 - e^{i\sqrt{3}p_y a})(a_m^\dagger a_{m-1} - b_m^\dagger b_{m-1}) + \text{h.c.} \end{aligned} \quad (47)$$



Для цепочки длиной в несколько десятков атомов собственные значения легко найти на компьютере. Для $t = 1$, $t_2 = 0.03$ уровни энергии изображены на рисунке. В статье [1] приведена картинка для точно таких же данных. Она полностью совпадает с приведённой здесь.

Тот же вид дисперсионного соотношения можно получить и аналитически. Это делается по точно тому же алгоритму, что и раньше, правда, формулы получаются значительно более громоздкие.

Формулу для энергии можно переписать в виде

$$\begin{aligned} \epsilon_p^2 = \left(4t_2 \sin \frac{\sqrt{3}p_y a}{2} \cos \frac{3p_x a}{2} - 4t_2 \sin \frac{\sqrt{3}p_y a}{2} \cos \frac{\sqrt{3}p_y a}{2} + \frac{t^2}{2t_2} \cot \frac{\sqrt{3}p_y a}{2} \right)^2 \\ - \frac{t^4}{4t_2^2} \cot^2 \frac{\sqrt{3}p_y a}{2} + t^2 \left(1 + 8 \cos^2 \frac{\sqrt{3}p_y a}{2} \right) = \\ = \left(a \cos \frac{3p_x a}{2} + b \right)^2 + c \end{aligned} \quad (48)$$

Это значит, что функции Грина в импульсном представлении —

$$\begin{aligned}
G_0^R(\omega, A, A, \vec{p}) &= \frac{\omega + \xi}{\omega^2 - \epsilon_p^2 + i\delta} \\
G_0^R(\omega, B, B, \vec{p}) &= \frac{\omega - \xi}{\omega^2 - \epsilon_p^2 + i\delta} \\
G_0^R(\omega, A, B, \vec{p}) &= \frac{\eta e^{-i\phi}}{\omega^2 - \epsilon_p^2 + i\delta} \\
G_0^R(\omega, B, A, \vec{p}) &= G_0^R(\omega, A, B, -\vec{p})^*
\end{aligned} \tag{49}$$

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

$$\begin{aligned}
G^R(m, s, m', s', p_y) &= G_0^R(m, s, m', s', p_y) \\
&\quad + \Delta E G_0^R(m, s, 0, A, p_y) G^R(0, A, m', s', p_y) \\
&\quad + \Delta E G_0^R(m, s, 0, B, p_y) G^R(0, B, m', s', p_y)
\end{aligned} \tag{50}$$

Для бесконечного ΔE уравнение на связанные состояния —

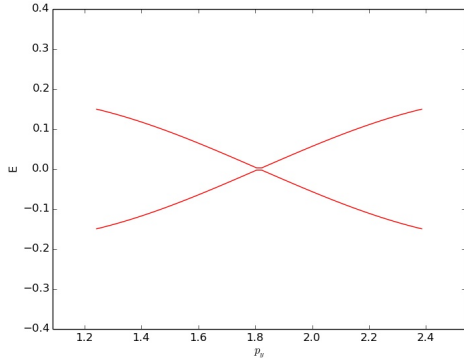
$$\det \begin{pmatrix} G_0^R(0, A, 0, A, p_y) & G_0^R(0, A, 0, B, p_y) \\ G_0^R(0, B, 0, A, p_y) & G_0^R(0, B, 0, B, p_y) \end{pmatrix} = 0 \tag{51}$$

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

$$G_0^R(m, s, m', s', p_y) = \nu_x \int \frac{dp_x}{2\pi} e^{i\vec{p}\vec{x}(m-m')} G_R^0(s, s', p_x, p_y) \tag{52}$$

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

$$\omega^2 = (a \cos k + b)^2 + c \tag{53}$$



Окончательные формулы весьма громоздки, поэтому приводить здесь мы их не будем. Уравнение (51) после всех подстановок становится обыкновенным алгебраическим уравнением. Оно решается на компьютере, и в результате снова получается знакомая нам зависимость энергии от квазиимпульса.

7.2 Отсутствие рассеяния для краевых состояний

После рассмотрения технических деталей того, как получить дисперсионное соотношение, обратимся к его физическому смыслу. На обоих рисунках присутствует две ветви, соответствующие краевым состояниям. В обоих случаях состояния, соответствующие этим ветвям, пространственно разнесены: в случае полосы состояния находятся на её разных краях, а в случае разделённой полуплоскости и вовсе находятся на её разных половинах. Таким образом, краю реально соответствует *одна* ветвь спектра, соответствующая распространению в выделенном направлении.

Здесь нужно вспомнить о том, что рассматривалась только одна "половина" гамильтониана, соответствующая $s = 1$. Спину $s = -1$ соответствует комплексно сопряжённый гамильтониан, что означает, что соответствующее краевое состояние будет распространяться в противоположном направлении.

Таким образом, окончательная картина такова: направление движения электрона по границе решётки находится в однозначном соответствии с его спином. К тому же, состояния, отличающиеся направлением движения (и спина), переходят друг в друга при обращении времени.

Замечательный факт состоит в том, что из-за симметрии относительно обращения времени никакое возмущение не может заставить эти состояния рассеяться друг в друга (см. [1])

Однако необходимым условием при построении модели Кейна–Меле было то, что в качестве атомных орбиталей выбираются s -орбитали. Дело в том, что только s -орбитали являются собственными состояниями для проекции спина (см. [10]). Поэтому представляет интерес построение модели с явным учётом p -зон.

8 Заключение

На простых примерах изучен подход сильной связи и то, как в этом подходе возникают локализованные состояния. Также рассмотрена простейшая модель со спин–орбитальным взаимодействием, для краевых состояний в которой явно найден закон дисперсии. В дальнейшем планируется явно построить модель сильной связи со спин–орбитальным взаимодействием с учётом p -орбиталей и исследовать краевые состояния в такой модели. В первую очередь будет изучаться вопрос о том, возможно ли рассеяние этих краевых состояний на примесях.

Список литературы

- [1] C. L. Kane and E. J. Mele. Quantum spin hall effect in graphene. *Physical Review Letters*, 95(22), Nov 2005.
- [2] M. Z. Hasan and C. L. Kane. Colloquium: Topological insulators. *Rev. Mod. Phys.*, 82(4):3045–3067, Nov 2010.
- [3] А. И. Ансельм. *Введение в теорию полупроводников*. М.: Наука, 1978.
- [4] А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, and И. Е. Дзялошинский. *Методы квантовой теории поля в статистической физике*. Москва, Физматгиз, 1962.
- [5] Л. В. Келдыш. Диаграммная техника для неравновесных процессов. *ЖЭТФ*, 1964.
- [6] Petr I. Arseev. О диаграммной технике для неравновесных систем: вывод, некоторые особенности и некоторые применения. *Усп. физ. наук*, 185(12):1271–1321, 2015.
- [7] И. Е. Тамм. О возможности связанных состояний электронов на поверхности кристалла. *Журнал экспериментальной и теоретической физики*, 1933.
- [8] William Shockley. On the surface states associated with a periodic potenti. *Phys. Rev.* 56, 1939.
- [9] S. Giglberger, L. E. Golub, V. V. Bel'kov, S. N. Danilov, D. Schuh, C. Gerl, F. Rohlfing, J. Stahl, W. Wegscheider, D. Weiss, and et al. Rashba and dresselhaus spin splittings in semiconductor quantum wells measured by spin photocurrents. *Physical Review B*, 75(3), Jan 2007.
- [10] В. Б. Берестецкий, Е.М. Лифшиц, and Л. П. Питаевский. *Курс теоретической физики, Квантовая электродинамика*. Москва, 1989.