Некоторые сюжеты о топологических изоляторах

Anikin Evgeny, 128

26 марта 2017 г.

1 Уровни энергии на точечной примеси

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

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

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.

2 Волновые функции

Попробуем вычислить их в том же приближении. Волновые функции даются компонентами свободной функции Грина:

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

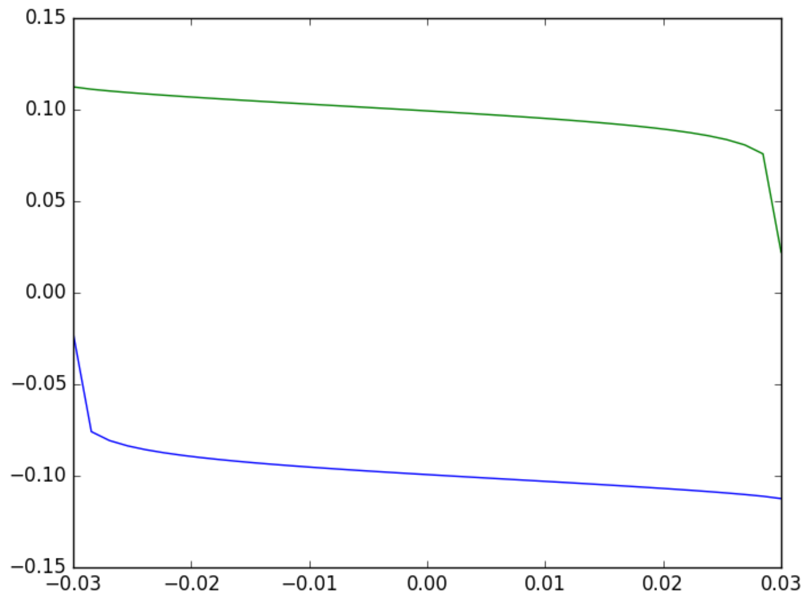

Рис. 1: Компоненты функций Грина

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,

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

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 уравнения Бесселя, получим

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

3 Tight–binding model

In the following paper we will consider a tight–binding model for p zone with spin–orbit interaction.

Before we start, let us remind the Clebsch–Gordan coefficients for the case $l = 1$, $s = \frac{1}{2}$. Let $a_{j,m}$ annihilate the state with angular momentum j and the projection m ($j \in \{3/2, 1/2\}$), and $b_{m,s}$ — the state with orbital momentum projection m ($j = 1$) and spin projection s.

$$\begin{aligned}
a_{\frac{3}{2},\frac{3}{2}} &= b_{1,\frac{1}{2}} \\
a_{\frac{3}{2},\frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{1}{3}}b_{1,-\frac{1}{2}} + \sqrt{\frac{2}{3}}b_{0,\frac{1}{2}} \\
a_{\frac{3}{2},-\frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{2}{3}}b_{0,-\frac{1}{2}} + \sqrt{\frac{1}{3}}b_{-1,\frac{1}{2}} \\
a_{\frac{3}{2},-\frac{3}{2}} &= b_{-1,-\frac{1}{2}} \\
a_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{2}{3}}b_{1,-\frac{1}{2}} - \sqrt{\frac{1}{3}}b_{0,\frac{1}{2}} \\
a_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} &= -\sqrt{\frac{1}{3}}b_{0,-\frac{1}{2}} + \sqrt{\frac{2}{3}}b_{-1,\frac{1}{2}}
\end{aligned} \tag{13}$$

After expressing the b operators using p_x, p_y and p_z, we immediately obtain

$$\begin{aligned}
a_{\frac{3}{2},\frac{3}{2}} &= \sqrt{\frac{1}{2}}\left(p_{x,\frac{1}{2}} - ip_{y,\frac{1}{2}}\right) \\
a_{\frac{3}{2},\frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{1}{6}}\left(p_{x,-\frac{1}{2}} - ip_{y,-\frac{1}{2}}\right) + \sqrt{\frac{2}{3}}p_{z,\frac{1}{2}} \\
a_{\frac{3}{2},-\frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{2}{3}}p_{z,-\frac{1}{2}} + \sqrt{\frac{1}{6}}\left(p_{x,\frac{1}{2}} + ip_{y,\frac{1}{2}}\right) \\
a_{\frac{3}{2},-\frac{3}{2}} &= \sqrt{\frac{1}{2}}\left(p_{x,-\frac{1}{2}} + ip_{y,-\frac{1}{2}}\right)
\end{aligned} \tag{14}$$

$$\begin{aligned}
a_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{1}{3}}\left(p_{x,-\frac{1}{2}} - ip_{y,-\frac{1}{2}}\right) - \sqrt{\frac{1}{3}}p_{z,\frac{1}{2}} \\
a_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} &= -\sqrt{\frac{1}{3}}p_{z,-\frac{1}{2}} + \sqrt{\frac{1}{3}}\left(p_{x,\frac{1}{2}} + ip_{y,\frac{1}{2}}\right)
\end{aligned} \tag{15}$$

As (18), (19) define a unitary transformation, p can be easily expressed via a.

The Hamiltonian is

$$\begin{aligned}
H_{\text{full}} = -\Delta E_{SO} a^\dagger_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} a_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} + \\
+ 2(t_\parallel \cos p_x + t_\perp \cos p_y) p^\dagger_{x,\frac{1}{2}} p_{x,\frac{1}{2}} + \\
+ 2(t_\perp \cos p_x + t_\parallel \cos p_y) p^\dagger_{y,\frac{1}{2}} p_{y,\frac{1}{2}} + \\
+ 2t_3(\cos p_x + \cos p_y) p^\dagger_{z,-\frac{1}{2}} p_{z,-\frac{1}{2}}
\end{aligned} \tag{16}$$

It contains the atomic spin–orbit part and the part which depends on the interaction between neighbour atoms.

After simple calculation we obtain the Hamiltonian matrix in the basis of p operators:

$$\begin{aligned}
H = -\frac{E_{SO}}{3}\begin{pmatrix} 1 & i & -1 \\ -i & 1 & i \\ -1 & -i & 1 \end{pmatrix} + \\
+ \begin{pmatrix} t_\parallel \cos p_x + t_\perp \cos p_y & 0 & 0 \\ 0 & t_\perp \cos p_x + t_\parallel \cos p_y & 0 \\ 0 & 0 & t_3(\cos p_x + \cos p_y) \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{17}$$

The energy levels for the case $\Delta E_{SO} = 1$, $t_\parallel = 0.3$, $t_3 = t_\perp = 0.15$ are shown on the figure.

In some cases it would be (maybe) more convenient to write the Hamiltonian in the basis of a operators. For solving that problem, the following observation would be useful.

Let $|A\rangle$ and $|B\rangle$ be the spinless states with angular momentum projections m and m'. Let $|A\rangle$ also be localised in $(0, 0)$, and $|B(\phi)\rangle$ — in $(r\cos\phi, r\sin\phi$. Then the following equation holds:

$$\langle A|B(\phi)\rangle = e^{-i(m-m')\phi}\langle A|B(0)\rangle \tag{18}$$

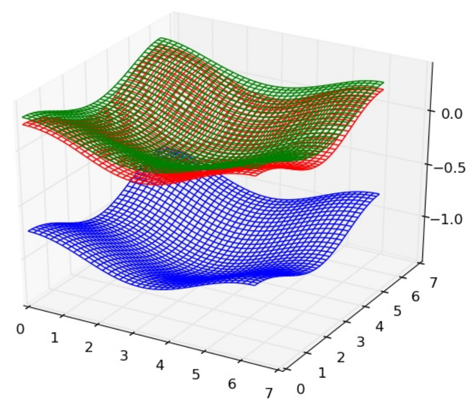

Рис. 2: Energy levels

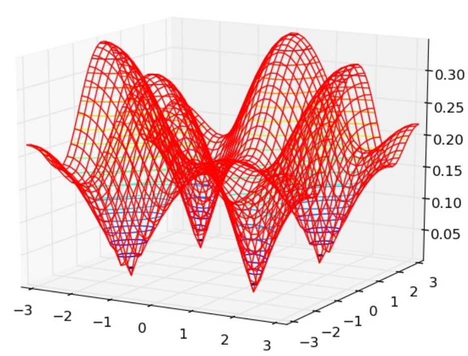

Рис. 3: The difference of two upper energy levels

That allows to write any tight–binding Hamiltonian directly in terms of a states.

First Let the angle be zero, and let the hopping integrals for the b operators be described by matrix

$$T_b = \begin{pmatrix} t_1 & 0 & t_2 \\ 0 & t_3 & 0 \\ t_2 & 0 & t_1 \end{pmatrix} \tag{19}$$

The t_i can be expressed via $t_\perp, t_\parallel$.

$$\begin{aligned} t_1 &= \frac{1}{2}\left(t_\parallel + t_\perp\right) \\ t_2 &= \frac{1}{2}\left(t_\parallel - t_\perp\right) \end{aligned} \tag{20}$$

Then for the states described by full momentum (a states) we obtain

$$T_x = \begin{pmatrix} t_1 & \frac{1}{\sqrt{3}}t_2 & \sqrt{\frac{2}{3}}t_2 \\ \frac{1}{\sqrt{3}}t_2 & \frac{1}{3}(t_1+2t_3) & \frac{\sqrt{2}}{3}(t_1-t_3) \\ \sqrt{\frac{2}{3}}t_2 & \frac{\sqrt{2}}{3}(t_1-t_3) & \frac{1}{3}(2t_1+t_3) \end{pmatrix} \tag{21}$$

For the arbitrary angle, as follows from 22,

$$T_\phi = \mathrm{diag}(e^{\frac{-3i\phi}{2}}, e^{\frac{i\phi}{2}}, e^{\frac{i\phi}{2}}) \times T_x \times \mathrm{diag}(e^{\frac{3i\phi}{2}}, e^{\frac{-i\phi}{2}}, e^{\frac{-i\phi}{2}}) = \\ = \begin{pmatrix} t_1 & \frac{1}{\sqrt{3}}t_2 e^{-2i\phi} & \sqrt{\frac{2}{3}}t_2 e^{-2i\phi} \\ \frac{1}{\sqrt{3}}t_2 e^{2i\phi} & \frac{1}{3}(t_1+2t_3) & \frac{\sqrt{2}}{3}(t_1-t_3) \\ \sqrt{\frac{2}{3}}t_2 e^{2i\phi} & \frac{\sqrt{2}}{3}(t_1-t_3) & \frac{1}{3}(2t_1+t_3) \end{pmatrix} \tag{22}$$

The Hamiltonian is now

$$H = \mathrm{diag}\,(0, 0, -\Delta E_{SO}) + 2\cos p_x T_0 + 2\cos p_y T_{\frac{\pi}{2}} + \\ + 2\cos(p_x+p_y)\tilde{T}_{\frac{\pi}{4}} + 2\cos(p_x-p_y)\tilde{T}_{-\frac{\pi}{4}} + \dots \tag{23}$$

We will treat the first term as the unperturbed system and all other as a perturbation. The unperturbed Hamiltonian has a pair of degenerate levels. The non–trivial topology can only exist due to "entaglement"of these levels. As we treat the T matrices as a perturbation, we will find the eigenfunctions and eigenvalues of the restricted perturbation matrix V.

$$V = \begin{pmatrix} a & b \\ b^* & c \end{pmatrix}, \quad \text{where} \\ a = 2t_1(\cos p_x + \cos p_y) + 4\tilde{t_1}\cos p_x \cos p_y, \\ b = \frac{2t_2}{\sqrt{3}}(\cos p_x - \cos p_y) + \frac{4i\tilde{t_2}}{\sqrt{3}}\sin p_x \sin p_y \\ c = \frac{2}{3}(t_1+2t_3)(\cos p_x + \cos p_y) + \frac{4}{3}(\tilde{t_1}+2\tilde{t_3})\cos p_x \cos p_y \tag{24}$$

The eigenvalues are

$$\epsilon = \frac{a + c \pm \sqrt{(a-c)^2 + 4|b|^2}}{2} \tag{25}$$

As can be seen from the structure of a, b, c coefficients, the gap between the bands doesn't vanish unless $a = c$ and $b = 0$ simultaneously. This is quite a special case and we will not consider it. Let us select, for example, the upper band. We can write two expressions for an eigenvector corresponding to p_x, p_y:

$$v_1 = \frac{1}{\sqrt{(\epsilon-a)^2+|b|^2}}\begin{pmatrix} b \\ \epsilon - a \end{pmatrix} \\ v_2 = \frac{1}{\sqrt{(\epsilon-c)^2+|b|^2}}\begin{pmatrix} \epsilon - c \\ b^* \end{pmatrix} \tag{26}$$

The only difference between v_1, v_2 is in the phase multiplier $e^{i\phi}$:

$$e^{i\phi} = \frac{\epsilon - c}{b}\sqrt{\frac{(\epsilon-a)^2+|b|^2}{(\epsilon-c)^2+|b|^2}} = \frac{b^*}{\epsilon - a}\sqrt{\frac{(\epsilon-a)^2+|b|^2}{(\epsilon-c)^2+|b|^2}} \tag{27}$$

The multiplier is well–defined when $b \neq 0$, and, as follows, outside the points $(p_x, p_y) = (0, 0)$ or $(p_x, p_y) = (\pi, \pi)$.

So we can consider its behavoir on a closed line (a small circle, for example) wrapping around the point $(p_x, p_y) = (0, 0)$. Obviously, $e^{i\phi} = e^{-i\,\mathrm{Arg}\,b}$. At small p,

$$b = \frac{t_2}{\sqrt{3}}(p_x^2 - p_y^2) + \frac{4i\tilde{t_2}}{3}p_x p_y + o(p^2) \tag{28}$$

After substituting $p_x = p\cos\alpha$, $p_y = p\sin\alpha$ we obtain

$$b = \frac{t_2 p^2}{\sqrt{3}}\cos 2\alpha + \frac{2i\tilde{t_2}p^2}{3}\sin 2\alpha + o(p^2) \tag{29}$$

Now it is obvious that the phase of $e^{i\phi}$ changes by 4π after p turns around $(0, 0)$. So, the Hamiltonian describes a topological insulator. However, as the index is odd, the total Hamiltonian (which includes spin up and down) is topologically trivial.

4 The Hamiltonian with p and s-type orbitals

The Hamiltonian written below is quite naive: it includes the overlapping p and s orbitals and the spin–orbit interaction.

$$\begin{aligned} H = \sum (E_s + 4t_s) s^\dagger_{mn} s_{mn} - t_s s^\dagger_{mn} (s_{m+1,n} + s_{m-1,n} + s_{m,n+1} + s_{m,n-1}) \\ + t_{sp} s^\dagger_{mn} (-p^x_{m+1,n} + p^x_{m-1,n} - p^y_{m,n+1} + p^y_{m,n-1}) + \text{h.c.} \\ + (p^x_{mn})^\dagger (t_\parallel (p^x_{m+1,n} + p^x_{m-1,n}) + t_\perp (p^x_{m,n+1} + p^x_{m,n-1})) \\ + (p^x_{mn})^\dagger (t_\perp (p^y_{m+1,n} + p^y_{m-1,n}) + t_\parallel (p^y_{m,n+1} + p^y_{m,n-1})) \\ + (p^z_{mn})^\dagger t_3 (p^z_{m+1,n} + p^z_{m-1,n} + p^z_{m,n+1} + p^z_{m,n-1}) \\ - \frac{E_{SO}}{3} \begin{pmatrix} p^\dagger_x & p^\dagger_y & p^\dagger_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & i & -1 \\ -i & 1 & i \\ -1 & -i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (30)$$