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

15 декабря 2016 г.

Содержание

Аннотация

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

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

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

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{2\pi\hbar}N \tag{2}$$

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 противоложно по знаку.

Первая экспериментальная реализация топологических изоляторов — квантовые ямы HgTe. [1, 2]

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 диагонализовать 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 γ) должно выполняться равенство

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

Определим число Черна, иначе называемое TKNN–инвариант (см. [3, 4]), как

$$N = \frac{1}{2\pi} \int_\gamma d\phi \tag{4}$$

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

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

В последнем интеграле подыинтегральное 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

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

Его можно явно диагонализовать. Собственные векторы равны

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

и соответствуют энергиям

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

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

$$N = \frac{1}{4\pi} \int \sin\theta \, d\theta d\phi \tag{9}$$

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 [5]) —

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

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 [6], 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 —

$$\hat{H} = \sum_{\langle ij \rangle \alpha} t c^\dagger_{i\alpha} c_{j\alpha} + \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle \alpha\beta} i t_2 \nu_{ij} s^z_{\alpha\beta} c^\dagger_{i\alpha} c_{i\beta} \tag{11}$$

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

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

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] 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.

[3] Mahito Kohmoto. Topological invariant and the quantization of the hall conductance. *Annals of Physics*, 160(2):343–354, Apr 1985.

[4] 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.

[5] 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.

[6] C. L. Kane and E. J. Mele. Quantum spin hall effect in graphene. *Physical Review Letters*, 95(22), Nov 2005.