

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

22 мая 2017 г.

Содержание

1	Введение	2
2	Топологический инвариант	2
2.1	Случай двух зон	3
3	Простые примеры топологических изоляторов	3
4	Спин–орбитальное взаимодействие в приближении сильной связи	4
5	Квантовая яма HgTe	7
6	Соответствие объём–граница	7
7	Примесь в двухуровневой модели	8
8	Заключение	9

Аннотация

Из модели сильной связи для полупроводника с сильным спин-орбитальным расщеплением выведен эффективный гамильтониан квантовой ямы. Показано, что этот гамильтониан описывает топологический изолятор. Для эффективного гамильтониана найден спектр одиночной примеси.

1 Введение

Топологические изоляторы — это кристаллы с особого рода зонной структурой. Они обладают многими замечательными особенностями, отличающими их от обычных изоляторов и полупроводников. В топологических изоляторах невозможно однозначно задать фазу функций Блоха во всей зоне Бриллюэна. Причина этого в том, что отличен от нуля топологический инвариант

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

Этот же инвариант определяет холловскую проводимость, измеренную в квантах магнитного потока:

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

Таким образом, в топологических изоляторах можно наблюдать эффект Холла в отсутствие магнитного поля. Наконец, точно так же, как в эффекте Холла, на границе топологических изоляторов всегда возникают краевые состояния, пересекающие запрещённую зону.

Эти краевые состояния обладают свойством киральности: электроны со спином вверх движутся в одну сторону, а со спином вниз — в другую. Кроме того, состояния с разным направлением движения составляют крамерсовский дублет. Из этого несложно получить, что эти состояния не могут рассеиваться друг в друга под действием какого-либо возмущения, то есть граница топологического изолятора представляет из себя идеальный одномерный проводник.

Несмотря на то, что подобное поведение частично подтверждается в экспериментах, существуют также и эксперименты [1], указывающие на наличие сопротивления у краевых мод. Поэтому представляют интерес механизмы, которые могут приводить к рассеянию краевых мод друг в друга.

Будущая цель нашей работы — исследовать стабильность краевых состояний в случае, когда в объёме присутствуют глубокие примеси (или, иначе говоря, возможность рассеяния с края на край). На глубоких примесях всегда возникают связанные состояния, которые могут лежать посередине запрещённой зоны. Это значит, что у них может быть ненулевое перекрытие с краевыми модами. На настоящий момент найден спектр одиночной примеси в простейшей модели топологического изолятора.

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.

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

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

Определим число Черна, иначе называемое TKNN-инвариант (см. [2, 3]), 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 .

2.1 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.

3 Простые примеры топологических изоляторов

Простейший гамильтониан с отличным от нуля TKNN-инвариантом (он рассматривался в [4], см. также [5]) —

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

Он возникает как эффективный гамильтониан, описывающий зону проводимости и зону тяжёлых дырок в более реалистичной модели полупроводника со спин–орбитальным взаимодействием (см. ниже). При $\xi < 0$ топологический инвариант в этой модели отличен от нуля.

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 —

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

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

$$H = |h| \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\phi} \\ \sin \theta e^{i\phi} & -\cos \theta \end{pmatrix}, \quad (12)$$

$$|h| \cos \theta = 2t_2(\sin px - \sin py - \sin p(x-y)),$$

$$|h| \sin \theta e^{i\phi} = t(1 + e^{-ipy} + e^{ip(x-y)})$$

4 Спин–орбитальное взаимодействие в приближении сильной связи

Необходимым “ингредиентом” для топологических изоляторов является спин–орбитальное взаимодействие. Экспериментальная реализация [5, 7] двумерного топологического изолятора — квантовая яма CdTe–HgTe–CdTe, составляющие которой — узкозонные полупроводники с сильным спин–орбитальным расщеплением. Для их описания давно применяются гамильтонианы Латтинжера и Кейна ([8, 9]). Однако эти гамильтонианы выводятся из симметричных соображений в $k \cdot p$ методе и, следовательно, дают спектр только в центре зоны Бриллюэна, а также не слишком интуитивно понятны.

Мы построили простую модель сильной связи, аналогичную модели Кейна, учитывающую валентную p -зону и s -зону проводимости. Как показано, она переходит в модель Кейна при малых k . Также она даёт возможность найти спектр во всей зоне Бриллюэна, а также интуитивно понятным образом описать одиночные примеси, границы образца, резкие изменения параметров и прочее.

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. В модели учитывались перекрытия орбиталей соседних атомов, а также внутриатомное спин–орбитальное взаимодействие. В литературе утверждается, что эффекты от межатомного спин–орбитального взаимодействия пренебрежимо малы.

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

следующим образом:

$$\begin{aligned}\Psi_{\frac{3}{2},\frac{3}{2}} &= \frac{X + iY}{\sqrt{2}}\alpha \\ \Psi_{\frac{3}{2},\frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{1}{3}}\frac{X + iY}{\sqrt{2}}\beta - \sqrt{\frac{2}{3}}Z\alpha \\ \Psi_{\frac{3}{2},-\frac{1}{2}} &= -\sqrt{\frac{1}{3}}\frac{X - iY}{\sqrt{2}}\alpha - \sqrt{\frac{2}{3}}Z\beta \\ \Psi_{\frac{3}{2},-\frac{3}{2}} &= -\frac{X - iY}{\sqrt{2}}\beta\end{aligned}\tag{13}$$

$$\begin{aligned}\Psi_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{2}{3}}\frac{X + iY}{\sqrt{2}}\beta + \sqrt{\frac{1}{3}}Z\alpha \\ \Psi_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} &= -\sqrt{\frac{2}{3}}\frac{X - iY}{\sqrt{2}}\alpha - \sqrt{\frac{1}{3}}Z\beta\end{aligned}\tag{14}$$

Здесь X, Y, Z — атомные орбитали, α, β — состояния со спином вверх и вниз.

Как хорошо известно, в атоме гамильтониан спин-орбитального взаимодействия имеет вид

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

Если орбитальный момент фиксирован, то энергия определяется полным моментом. Таким образом, спин-орбитальное взаимодействие приводит к расщеплению состояний с моментами $\frac{3}{2}$ и $\frac{1}{2}$.

Пусть матричные элементы перекрытия p -орбиталей — t_{\parallel} и t_{\perp} . Тогда несложно показать, что гамильтониан тяжёлых и лёгких дырок в импульсном представлении —

$$\begin{aligned}H_v &= [H_l \quad H_r], \\ H_l &= \begin{pmatrix} (t_{\parallel} + t_{\perp})(\cos p_x + \cos p_y) + 2t_{\perp} \cos p_z & 0 \\ 0 & \left(\frac{t_{\parallel}}{3} + \frac{5t_{\perp}}{3}\right)(\cos p_x + \cos p_y) + \left(\frac{2t_{\perp}}{3} + \frac{4t_{\parallel}}{3}\right)\cos p_z \\ -\frac{1}{\sqrt{3}}(t_{\parallel} - t_{\perp})(\cos p_x - \cos p_y) & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}(t_{\parallel} - t_{\perp})(\cos p_x - \cos p_y) \end{pmatrix} \\ H_r &= \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{3}}(t_{\parallel} - t_{\perp})(\cos p_x - \cos p_y) & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}(t_{\parallel} - t_{\perp})(\cos p_x - \cos p_y) \\ \left(\frac{t_{\parallel}}{3} + \frac{5t_{\perp}}{3}\right)(\cos p_x + \cos p_y) + \left(\frac{2t_{\perp}}{3} + \frac{4t_{\parallel}}{3}\right)\cos p_z & 0 \\ 0 & (t_{\parallel} + t_{\perp})(\cos p_x + \cos p_y) + 2t_{\perp} \cos p_z \end{pmatrix}\end{aligned}\tag{16}$$

Э разумеется, ту матрицу можно разложить около нуля. Тогда получится хорошо известный гамильтониан Латтинжера [8]:

$$H_v = -\left(\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma_2\right)k^2 + 2\gamma_2(k_x^2 J_x^2 + k_y^2 J_y^2 + k_z^2 J_z^2),\tag{17}$$

где J_i — операторы момента для спина $\frac{3}{2}$, $\gamma_1 = \frac{1}{3}t_{\parallel}$, $\gamma_2 = \frac{1}{6}(t_{\parallel} - t_{\perp})$, $\gamma_3 = 0$ (последнее слагаемое из гамильтониана Латтинжера опущено).

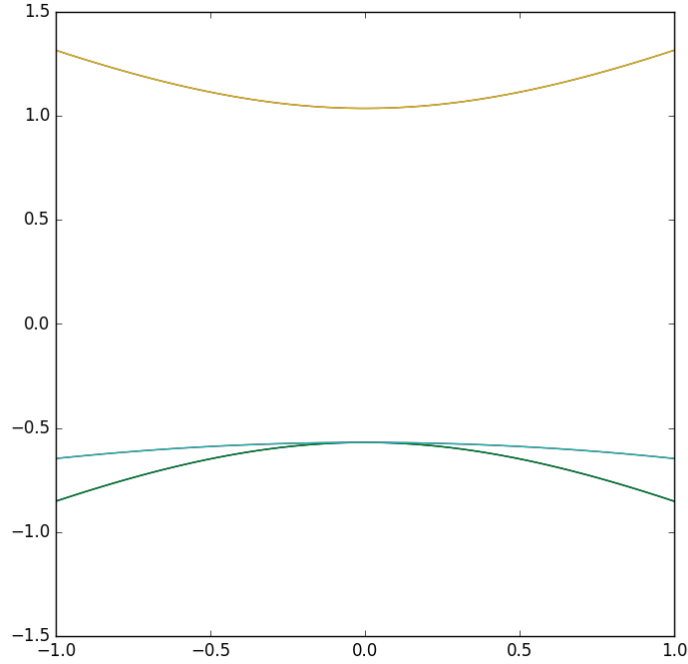


Рис. 1: На графике изображены ветви спектра CdTe в модели Кейна для параметров из [10]. По оси абсцисс отложен волновой вектор в nm^{-1} , по оси ординат — энергия в eV.

Теперь учтём перекрытие с s -зоной. Оно задаётся матрицей

$$T = P \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}}(\sin p_x + i \sin p_y) & \sqrt{\frac{2}{3}} \sin p_z & \frac{1}{\sqrt{6}}(\sin p_x - i \sin p_y) & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}}(\sin p_x + i \sin p_y) & \sqrt{\frac{2}{3}} \sin p_z & \frac{1}{\sqrt{2}}(\sin p_x - i \sin p_y) \end{pmatrix}, \quad (18)$$

где $P = 2i\langle s(x + e_x) | \hat{H} | p_x(x) \rangle$. Наконец, гамильтониан самой s -зоны можно записать как

$$H_c = (E_s + \frac{1}{m_s}(3 - \cos p_x - \cos p_y - \cos p_z))I_{2 \times 2} \quad (19)$$

Состояниями с полным моментом $\frac{1}{2}$ можно пренебречь, если спин-орбитальное взаимодействие велико. Таким образом мы получаем гамильтониан с учётом s -зоны проводимости, зон тяжёлых и лёгких дырок в виде

$$H_{\text{full}} = \begin{pmatrix} H_c & T \\ T^\dagger & H_v \end{pmatrix}, \quad (20)$$

где H_c, T, H_v определены выше. Линеаризуя его, мы получим гамильтониан модели Кейна [9].

Спектр такой модели не может быть найден аналитически для произвольных k_x, k_y, k_z . Однако ветви спектра можно легко найти, если, например, $k_x = k_y = 0$. Для этого случая спектр в окрестности центра зоны Бриллюэна изображён на рисунке. Как видно, он состоит из трёх ветвей: одной электронной ветви и двух ветвей дырок, тяжёлых и лёгких.

Таким образом, простая модель сильной связи воспроизводит известные свойства полупроводников со спин-орбитальным взаимодействием.

5 Квантовая яма HgTe

В предыдущем параграфе речь шла о кубическом кристалле. Теперь рассмотрим квантовую яму и покажем, что она является топологическим изолятором, причём её можно описывать с помощью эффективного гамильтониана (10).

Для простоты рассмотрим несколько нереалистичную ситуацию: пусть яма представляет собой слой толщиной в один атом. Это приведёт к тому, что в гамильтониане (20) нужно будет выкинуть все слагаемые, содержащие p_z . В результате гамильтониан 6×6 распадётся на два блока 3×3 .

Рассмотрим один из этих блоков. Он имеет вид

$$H = \begin{pmatrix} E_s + \frac{1}{m^*}(2 - \cos p_x - \cos p_y) & -\frac{P}{\sqrt{2}}(\sin p_x + i \sin p_y) & \frac{P}{\sqrt{6}}(\sin p_x - i \sin p_y) \\ -\frac{P}{\sqrt{2}}(\sin p_x + i \sin p_y) & (t_{\parallel} + t_{\perp})(\cos p_x + \cos p_y) & -\frac{1}{\sqrt{3}}(t_{\parallel} - t_{\perp})(\cos p_x - \cos p_y) \\ \frac{P}{\sqrt{6}}(\sin p_x - i \sin p_y) & -\frac{1}{\sqrt{3}}(t_{\parallel} - t_{\perp})(\cos p_x - \cos p_y) & \left(\frac{t_{\parallel}}{3} + \frac{5t_{\perp}}{3}\right)(\cos p_x + \cos p_y) \end{pmatrix} \quad (21)$$

Обратим внимание на одно важное отличие (21) от (20). В (20) дырочные состояния с $p = 0$ четырёхкратно вырождены из-за кубической симметрии. Выкидывая слагаемые с p_z , мы нарушаем симметрию, поэтому в (21) вырождение дырочных состояний снимается.

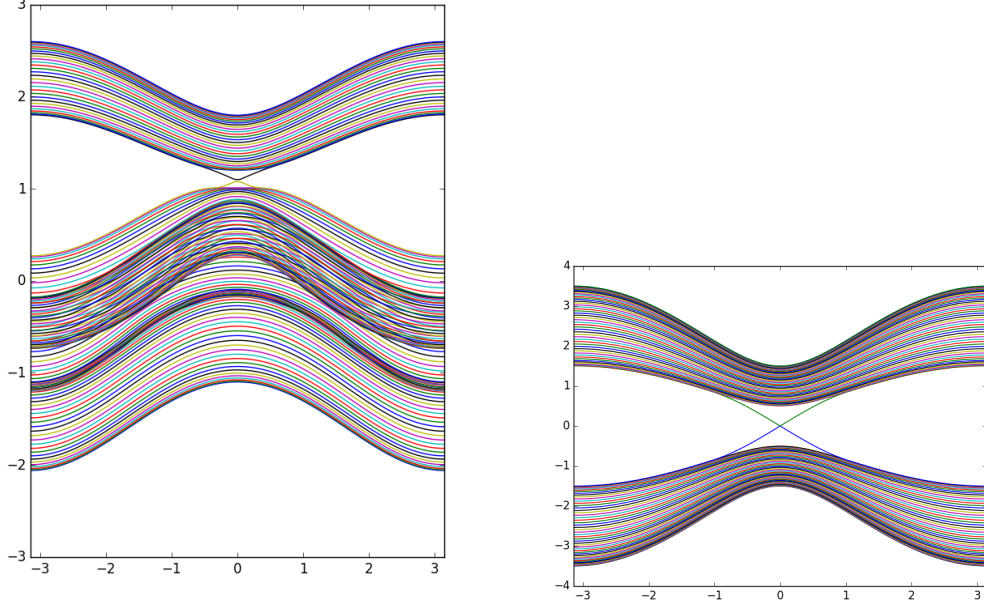
Предположим, что расстояние между центром s -зоны и одной из дырочных зон много меньше, чем расстояние между дырочными зонами. Тогда другую дырочную зону при малых k можно исключить из рассмотрения, после чего гамильтониан для оставшихся зон будет иметь вид (10).

Более аккуратно эффективный гамильтониан можно вывести, рассматривая более реалистичную ситуацию в приближении эффективной массы. В [5] авторы находят волновую функцию связанного состояния в яме CdTe–HgTe–CdTe при $k_x = k_y = 0$, после чего ищут закон дисперсии в рамках $k \cdot p$ метода. Оказывается, что при некоторой критической толщине квантовой ямы уровни размерного квантования E1 и H1 становятся вырожденными, из-за чего становится возможным пренебречь их взаимодействием с другими уровнями размерного квантования и пользоваться эффективным двухуровневым гамильтонианом.

6 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.



7 Примесь в двухуровневой модели

Для гамильтониана (10) рассмотрим простейшую возможную примесь, а именно — потенциальную яму на одном из узлов решётки. В подходе сильной связи её гамильтониан —

$$V = \Delta E(a_{00}^\dagger a_{00} + b_{00}^\dagger b_{00}) \quad (22)$$

Уровни энергии (10) —

$$E_p^2 = \left(\xi + \frac{1}{m}(2 - \cos p_x - \cos p_y)\right)^2 + 4t^2(\sin^2 p_x + \sin^2 p_y) \quad (23)$$

Связанные состояния, как известно, даются уравнением на функцию Грина:

$$\det \left[\mathbb{1} - \Delta E \int \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} \frac{\omega + \hat{H}}{\omega^2 - E_p^2} \right] = 1 \quad (24)$$

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

$$\begin{cases} \int \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} \frac{\omega + \xi + \frac{1}{m}(2 - \cos p_x - \cos p_y)}{\omega^2 - E_p^2} = \frac{1}{\Delta E}, \\ \int \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} \frac{-\omega + \xi + \frac{1}{m}(2 - \cos p_x - \cos p_y)}{\omega^2 - E_p^2} = -\frac{1}{\Delta E}, \end{cases} \quad (25)$$

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

$$G(\omega, 0, 0)_{11} = -\frac{1}{8\pi} \frac{1}{m(4t^2 + \frac{\xi}{m})} \left[p_{\max}^2 + \left(2m(\omega + \xi) - \frac{\xi^2 - \omega^2}{4t^2 + \frac{\xi}{m}} \right) \log \left(1 + \frac{(4t^2 + \frac{\xi}{m}) p_{\max}^2}{\xi^2 - \omega^2} \right) \right] \quad (26)$$

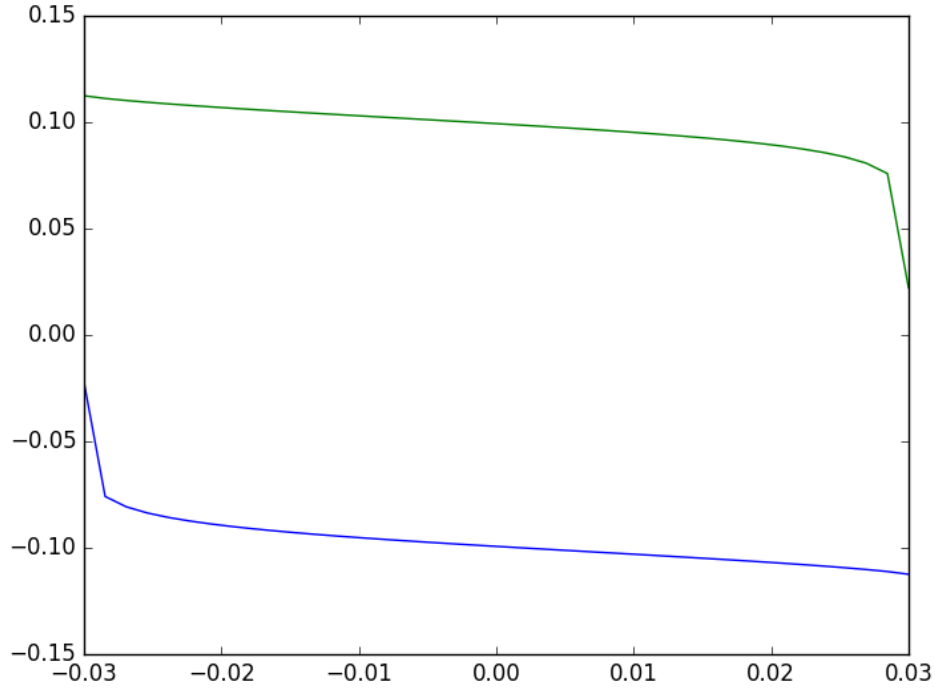


Рис. 2: Компоненты функций Грина

Конечно, интегралы из (25) 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.

8 Заключение

Найденный спектр примесных состояний будет важен для рассмотрения влияния примесей на образец близи границы. Как видно, примесные состояния могут иметь любую энергию из запрещённой зоны. Значит, в принципе, возможно, что наличие таких примесей в объёме будет разрушать краевые состояния. В будущем мы планируем подробнее исследовать этот вопрос.

Список литературы

- [1] G. M. Gusev, Z. D. Kvon, O. A. Shegai, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretzky, and J. C. Portal. Transport in disordered two-dimensional topological insulators. *Physical Review B*, 84(12), Sep 2011.
- [2] Mahito Kohmoto. Topological invariant and the quantization of the hall conductance. *Annals of Physics*, 160(2):343–354, Apr 1985.
- [3] 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.
- [4] 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.
- [5] 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.
- [6] C. L. Kane and E. J. Mele. Quantum spin hall effect in graphene. *Physical Review Letters*, 95(22), Nov 2005.
- [7] 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.
- [8] J. M. Luttinger. Quantum theory of cyclotron resonance in semiconductors: General theory. *Physical Review*, 102(4):1030–1041, May 1956.
- [9] Evan O. Kane. Band structure of indium antimonide. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 1(4):249–261, Jan 1957.
- [10] 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.