Некоторые сюжеты о топологических изоляторах

Anikin Evgeny, 128

30 марта 2017 г.

1 Введение: Модель сильной связи (tight-binding model) для топологического изолятора

Простейший топологический изолятор описывается гамильтонианом [1]

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

Спектр этого гамильтониана несложно вычислить:

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

Как видно, гамильтониан описывает две симметричные зоны, щель между которыми равна $2|\xi|$. Оказывается, при $\xi > 0$ гамильтониан описывает обычный изолятор, тогда как при $\xi < 0$ — топологический.

Гамильтониан (1) задан во всей зоне Бриллюэна, поэтому, делая обратное преобразование Фурье, можно можно перейти к решёточному гамильтониану (также называемому гамильтонианом сильной связи или tight–binding model).

Решёточный гамильтониан выглядит так:

$$\begin{aligned} H_{\text{lattice}} = \sum_{mn} \Bigg\{ a_{mn}^\dagger \left(\left(\xi + \frac{2}{m} \right) a_{mn} - \frac{1}{2m}(a_{m+1,n} + a_{m-1,n} + a_{m,n+1} + a_{m,n-1}) \right) \\ - ita_{mn}^\dagger (b_{m+1,n} - b_{m-1,n} - i(b_{m,n+1} - b_{m,n-1})) \\ - itb_{mn}^\dagger (a_{m+1,n} - a_{m-1,n} + i(a_{m,n+1} - a_{m,n-1})) \\ - b_{mn}^\dagger \left(\left(\xi + \frac{2}{m} \right) b_{mn} - \frac{1}{2m}(b_{m+1,n} + b_{m-1,n} + b_{m,n+1} + b_{m,n-1}) \right) \Bigg\} \end{aligned} \tag{3}$$

Здесь a_{mn}, b_{mn} — операторы уничтожения состояний зоны проводимости и валентной зоны соответственно на узле (m, n). Непосредственно обобщая этот решёточный гамильтониан, можно рассматривать решётку конечного размера, добавлять примеси и так далее.

2 Точечная примесь

2.1 Энергия связанных состояний

Гамильтониан примеси в модели сильной связи, описанной выше, можно записать в виде

$$V = \Delta E(a_{00}^\dagger a_{00} + b_{00}^\dagger b_{00}) \tag{4}$$

Связанные состояния даются уравнением

$$\det \left[\mathbb{1} - \Delta E \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \frac{\omega + \hat{H}}{\omega^2 - E_p^2} \right] = 1 \tag{5}$$

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

$$G(\omega, 0, 0)_{11} = \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \frac{\omega + \xi + \frac{1}{m}(2 - \cos p_x - \cos p_y)}{\omega^2 - E_p^2} = \frac{1}{\Delta E}, \tag{6}$$

$$G(\omega, 0, 0)_{22} = \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \frac{-\omega + \xi + \frac{1}{m}(2 - \cos p_x - \cos p_y)}{\omega^2 - E_p^2} = -\frac{1}{\Delta E}, \tag{7}$$

Эти интегралы можно взять приближённо в круге радиуса $p_{\max}$, если учесть, что при малых p спектр близок к коническому. Можно считать, что $p_{\max} \sim 1$. После интегрирования получается

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

Используя это выражение, можно решить уравнения (6) на связанные состояния. Оказывается, что для $\xi < 0$ связанные состояния в запрещённой зоне существуют для сколь угодно глубокой ямы. Для $\xi > 0$ это не так.

Будем решать уравнение (6), используя приближение (8). Сделаем предположение, что $\omega = \xi + \delta\omega$, где $|\delta\omega| \ll |\xi|$ (ответ покажет, что это предположение почти всегда выполняется). Тогда можно выкинуть малые поправки из приближённого выражения для функции Грина (8). Получается уравнение

$$G(\omega,0,0)_{11} = -\frac{1}{8\pi}\frac{1}{m(4t^2+\frac{\xi}{m})}\left[p_{\max}^2 + 4m\xi\log\left(1+\frac{\left(4t^2+\frac{\xi}{m}\right)p_{\max}^2}{-\xi\,\delta\omega}\right)\right] = \frac{1}{\Delta E} \tag{9}$$

Рассмотрим случай большого ΔE. В этом случае очевидно, что при $\xi > 0$ решений уравнения (9) нет, так как $\delta\omega < 0$ и логарифм в формуле — большое положительное число. Для $\xi < 0$, напротив, логарифм приобретает знак минус, и получается решение

$$\delta\omega \approx \frac{\left(4t^2+\frac{\xi}{m}\right)p_{\max}^2}{|\xi|}\exp\left\{-\frac{p_{\max}^2}{4m|\xi|} - \frac{8\pi}{4m^2|\xi|\Delta E\left(4t^2+\frac{\xi}{m}\right)}\right\} \tag{10}$$

Уравнение (7) переходит в (6) при замене $\omega \to -\omega$, $\Delta E \to -\Delta E$.

Интегралы из (6),(7) можно взять численно. Для $\xi, m, t = -0.03, 0.1, 0.5$ на графике изображены найденные численно уровни энергии. Экспоненциальные хвосты на этом графике хорошо видны.

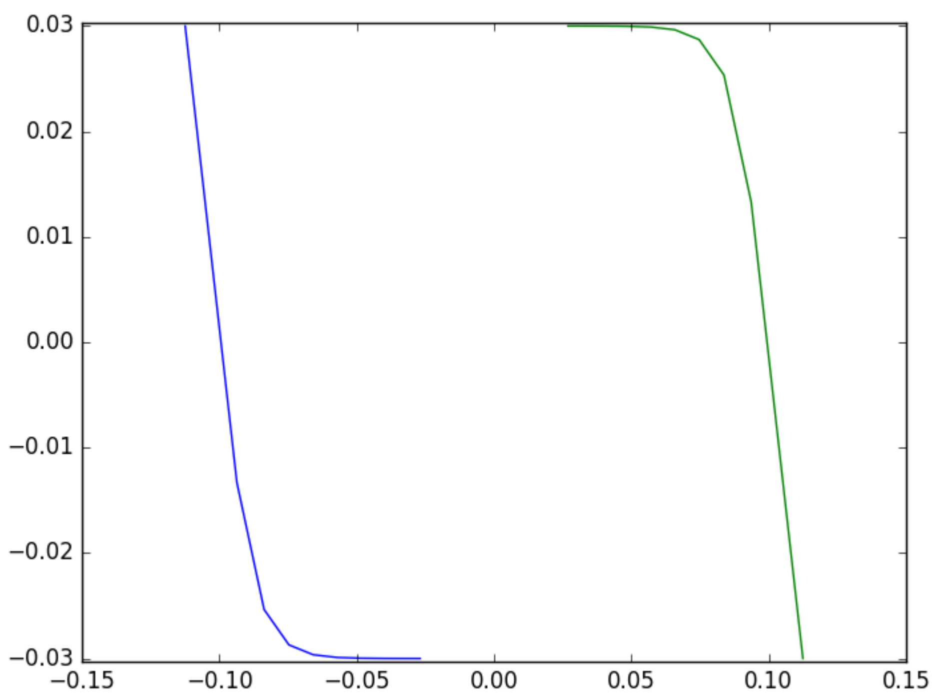

Рис. 1: На графике показаны уровни энергии связанных состояний на точечной примеси. По оси абсцисс отложена обратная глубина ямы, ΔE^{-1}. «Хвосты» обоих графиков должны быть продолжены до бесконечности, у синего графика — вправо снизу, у зелёного — влево сверху. Видно, что при бесконечной глубине ямы имеются два слабо связанных состояния.

2.2 Волновые функции

Волновые функции даются компонентами свободной функции Грина:

$$\Psi_{\alpha,i}(x) = G_0(x)_{\alpha i} \tag{11}$$

Здесь α — “спинорный” индекс, а i — индекс, соответствующий номеру волновой функции.

Функция Грина —

$$G_0(x) = \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2}\frac{\omega+\hat{H}}{\omega^2-E_p^2}e^{ipx} \tag{12}$$

Их можно вычислить с помощью формального трюка. Определим новую функцию $F(x,y)$:

$$F(x,y) =\equiv \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2}\frac{e^{ip_x x+ip_y y}}{\omega^2-E_p^2} \tag{13}$$

Несложно понять, что компоненты функций Грина выражаются (точными соотношениями) через $F(x,y)$. А именно,

$$\begin{aligned} G_{11} &= (\omega+\xi)F(x,y) - \frac{1}{m}(F(x+1,y)+F(x-1,y)+F(x,y+1)+F(x,y-1)-4F(x,y)) \\ G_{21} &= -it(F(x+1,y)-F(x-1,y)) + t(F(x,y+1)-F(x,y-1)) \end{aligned} \tag{14}$$

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.

$$F(x,y) \approx -\int \frac{p\,dp\,d\cos\theta}{(2\pi)^2}\frac{e^{ipr\cos\theta}}{\xi^2-\omega^2-(4t^2+\frac{\xi}{m})p^2} = -\frac{1}{2\pi}\frac{1}{4t^2+\frac{\xi}{m}}K_0\left(\sqrt{\frac{\xi^2-\omega^2}{4t^2+\frac{\xi}{m}}}R\right) \tag{15}$$

Разности (14) можно аппроксимировать производными. Пользуясь тем, что $K_0(x)$ — решение модифицированного уравнения Бесселя, получим

$$
\begin{aligned}
G_{11} &= -\frac{1}{2\pi}\frac{1}{4t^2+\frac{\xi}{m}}\left(\omega+\xi-\frac{1}{m}\frac{\xi^2-\omega^2}{4t^2+\frac{\xi}{m}}\right)K_0\left(\sqrt{\frac{\xi^2-\omega^2}{4t^2+\frac{\xi}{m}}}R\right)\\
G_{21} &= \frac{it}{\pi}\sqrt{\frac{\xi^2-\omega^2}{(4t^2+\frac{\xi}{m})^3}}K_0'\left(\sqrt{\frac{\xi^2-\omega^2}{4t^2+\frac{\xi}{m}}}R\right)e^{i\theta}
\end{aligned}
\tag{16}
$$

3 Квантовая яма CdTe–HgTe–CdTe в модели сильной связи

В этом разделе будет рассмотрена модель сильной связи для квантовой ямы. В рамках модели найдены уровни размерного квантования. Результаты более–менее согласуются с расчётом в $k \cdot p$–приближении [1].

3.1 Модель однородного полупроводника

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 проекцими спина.

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 через коэффициенты Клебша–Гордана:

$$
\begin{aligned}
\Psi_{\frac{3}{2},\frac{3}{2}} &= \frac{X+iY}{\sqrt{2}}\alpha\\
\Psi_{\frac{3}{2},\frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{1}{3}}\frac{X+iY}{\sqrt{2}}\beta-\sqrt{\frac{2}{3}}Z\alpha\\
\Psi_{\frac{3}{2},-\frac{1}{2}} &= -\sqrt{\frac{1}{3}}\frac{X-iY}{\sqrt{2}}\alpha-\sqrt{\frac{2}{3}}Z\beta\\
\Psi_{\frac{3}{2},-\frac{3}{2}} &= -\frac{X-iY}{\sqrt{2}}\beta
\end{aligned}
\tag{17}
$$

$$
\begin{aligned}
\Psi_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{2}{3}}\frac{X+iY}{\sqrt{2}}\beta+\sqrt{\frac{1}{3}}Z\alpha\\
\Psi_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} &= -\sqrt{\frac{2}{3}}\frac{X-iY}{\sqrt{2}}\alpha-\sqrt{\frac{1}{3}}Z\beta
\end{aligned}
\tag{18}
$$

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

Спин–орбитальное взаимодействие приводит к расщеплению состояний с моментами $\frac{3}{2}$ и $\frac{1}{2}$. Состояниями с полным моментом $\frac{1}{2}$ можно пренебречь, если спин–орбитальное взаимодейтвие велико. Таким образом, в каждом узле решётки остаётся пара s–орбиталей, формирующая валентную зону, и четыре состояния с полным моментом $\frac{3}{2}$. Матричные элементы перекрытия между состояниями на соседних узлах выражаются через перекрытия s и p орбиталей с использованием выражений (17).

Определим матричные элементы $t_\parallel$ и $t_\perp$ для перекрытия соседних p–орбиталей, расположенных соответственно «вдоль» и «поперёк», $\frac{-iP}{2}$ для перекрытия s и p–орбитали и $-\frac{1}{2m_s}$ — для s–орбиталей. Через них полный гамильтониан сильной связи записывается в импульсном представлении в виде огромной матрицы 6×6.

$$
H_{\text{full}} = \begin{pmatrix} H_c & T \\ T^\dagger & H_v \end{pmatrix}, \tag{19}
$$

Матрицы H_c, T, H_v определены формулами (22)–(24), см. стр. 4.

Можно разложить гамильтониан по малым p. При разложении H_v получится гамильтониан Латтинжера:

$$
H_v = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\left\{-\left(\gamma_1+\frac{5}{2}\gamma_2\right)k^2+2\gamma_2(k_x^2J_x^2+k_y^2J_y^2+k_z^2J_z^2)+4\gamma_3(k_xk_yJ_xJ_y+k_xk_zJ_xJ_z+k_yk_zJ_yJ_z)\right\} \tag{20}
$$

где J_i — операторы момента для спина $\frac{3}{2}$, a — постоянная решётки, m — масса электрона,

$$
\begin{aligned}
\frac{\hbar^2}{2ma^2}\gamma_1 &= \frac{1}{3}t_\parallel\\
\frac{\hbar^2}{2ma^2}\gamma_2 &= \frac{1}{6}(t_\parallel - t_\perp)\\
\gamma_3 &= 0
\end{aligned}
\tag{21}
$$

Разложение H_c и T тривиально. Всё это вместе воспроизводит модель Кейна, которую обычно получают в $k \cdot p$ приближении.

Коэффициенты перескока в сильной связи можно зафиксировать требованием, чтобы при малых p воспроизводился $k \cdot p$ гамильтониан с значениями параметров, известных из эксперимента [3].

3.2 Модель квантовой ямы

Квантовая яма представляет из себя последовательно расположенные слои CdTe, HgTe и CdTe. Это можно непосредственно реализовать как модель сильной связи с двумя типами узлов, которую затем несложно диагонализовать численно. Спектр этой модели состоит из густо расположенных двумерных зон, соответствующих объёмным состояниям CdTe, и двумерных зон размерного квантования HgTe, расположенных в запрещённой зоне CdTe.

$$H_c = (E_s + \frac{1}{m_s}(3 - \cos p_x - \cos p_y - \cos p_z))I_{2\times 2} \tag{22}$$

$$T = P \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}}(\sin p_x + i \sin p_y) & \sqrt{\frac{2}{3}} \sin p_z & \frac{1}{\sqrt{6}}(\sin p_x - i \sin p_y) & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}}(\sin p_x + i \sin p_y) & \sqrt{\frac{2}{3}} \sin p_z & \frac{1}{\sqrt{2}}(\sin p_x - i \sin p_y), \end{pmatrix}, \tag{23}$$

$$H_v = \begin{pmatrix} (t_\parallel + t_\perp)(\cos p_x + \cos p_y) + 2t_\perp \cos p_z & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}(t_\parallel - t_\perp)(\cos p_x - \cos_{p_y}) & 0 \\ 0 & \left(\frac{t_\parallel}{3} + \frac{5t_\perp}{3}\right)(\cos p_x + \cos p_y) + \left(\frac{2t_\perp}{3} + \frac{4t_\parallel}{3}\right) \cos p_z & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}(t_\parallel - t_\perp)(\cos p_x - \cos_{p_y}) \\ -\frac{1}{\sqrt{3}}(t_\parallel - t_\perp)(\cos p_x - \cos_{p_y}) & 0 & \left(\frac{t_\parallel}{3} + \frac{5t_\perp}{3}\right)(\cos p_x + \cos p_y) + \left(\frac{2t_\perp}{3} + \frac{4t_\parallel}{3}\right) \cos p_z & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}(t_\parallel - t_\perp)(\cos p_x - \cos_{p_y}) & 0 & (t_\parallel + t_\perp)(\cos p_x + \cos p_y) + 2t_\perp \cos p_z \end{pmatrix} \tag{24}$$

Для двух уровней размерного квантования можно написать эффективный гамильтониан, учитывающий только их. Оказывается, что этот гамильтониан при малых k_x, k_y превращается в две копии (1), переходящие друг в друга при обращении времени. ξ из гамильтониана (1) — это расстояние между уровнями размерного квантования при k_x, k_y. Таким образом, в тот момент, когда два уровня размерного квантования пересекаются, эффективный гамильтониан для этих уровней становится гамильтонианом топологического изолятора. Согласно [1], это происходит при толщине ямы, равной 6.4 nm. У меня получилось, что критическая толщина равна ≈ 7.5 nm.

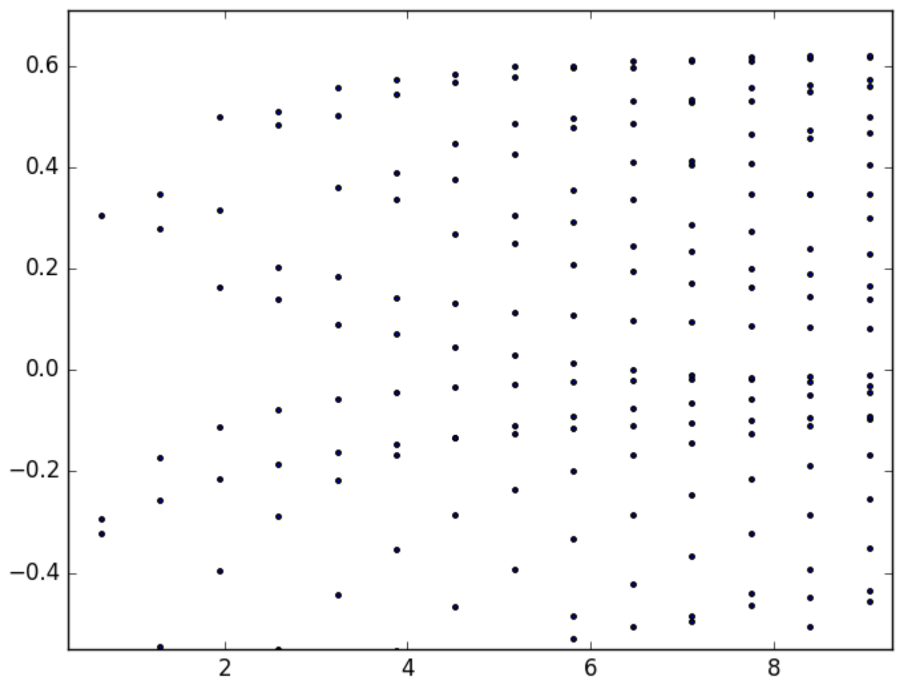

Рис. 2: На графике изображены уровни размерного квантования, полученные численной диагонализацией, для $k_x, k_y = 0$ в зависимости от толщины слоя HgTe, nm. Видно, что два уровня размерного пересекаются при $d \approx 7.5$.

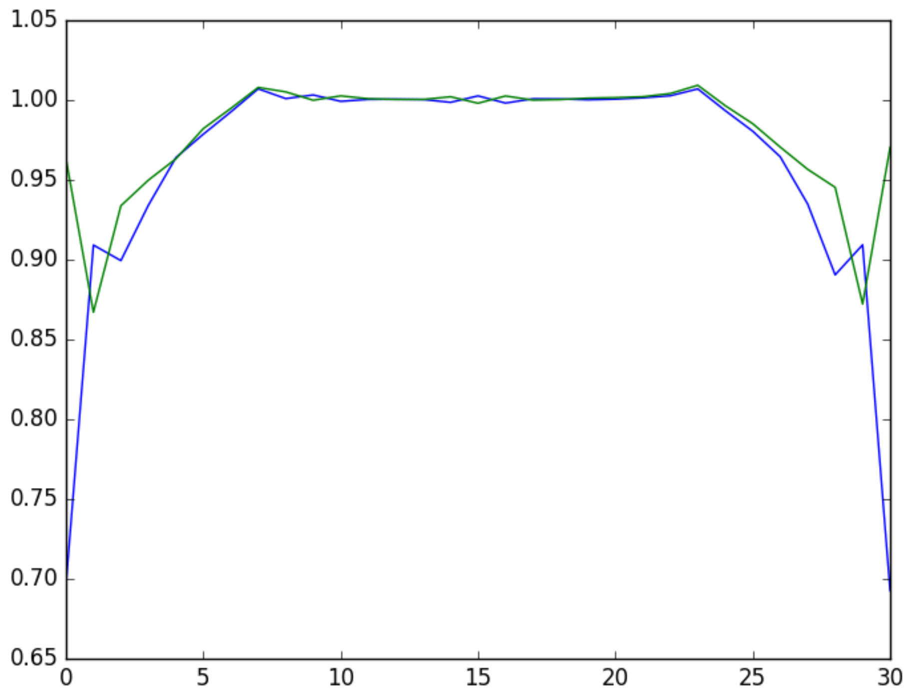

Рис. 3: Плотности электронов со спином вверх и вниз в самосогласованном решении для топологического изолятора с точечным отталкиванием

4 Реконструкция края

В данном разделе рассматривается реконструкция края (аналогично [4]) в модели сильной связи (1) из [1].

Как известно, на границе топологического изолятора всегда возникают краевые состояния. Если T–симметрия не нарушена, то состояния с противоположными спинами и импульсами образуют крамерсовский дублет. Поэтому они не могут рассеиваться друг в друга ни на каком T–инвариантном возмущении.

При учёте электрон–электронного взаимодействия, однако, T–симметрия может спонтанно нарушиться. Для случая топологического изолятора интересна ситуация, когда спонтанная намагниченность возникает около края. Это приведёт к тому, что краевые состояния больше не будут топологически защищёнными. Могут, в частности, появиться дополнительные краевые моды, пересекающие запрещённую зону, и их набор может стать различным для спина вверх и спина вниз (именно это и называется реконструкцией).

В дальнейшем будет использоваться приближение Хартри–Фока для точечного отталкивания:

$$V_{\text{int}} = g \sum_{i,j} \hat{n}_{ij\uparrow} \hat{n}_{ij\downarrow} \tag{25}$$

$$V_{\text{Hartree-Fock}} = g \sum_{i,j} \hat{n}_{ij\uparrow} \langle \hat{n}_{ij\downarrow} \rangle + \langle \hat{n}_{ij\uparrow} \rangle \hat{n}_{ij\downarrow} - \langle \hat{n}_{ij\uparrow} \rangle \langle \hat{n}_{ij\downarrow} \rangle \tag{26}$$

Здесь $i{,}j$ — номера узлов решётки, $\hat{n}_{ij}$ — оператор плотности на узле.

Согласно [4], для топологического изолятора с резкой границей реконструкции не происходит. Однако реконструкция возможна, если около края есть плавный отталкивательный потенциал вида

$$\hat{U} = U_0 \sum_{i<L_p,j} \left(1 - \frac{i}{L}\right) \hat{n}_{ij} \tag{27}$$

Мы провели численную диагонализацию решёточного гамильтониана (1) с потенциалом (27) и точечным отталкиванием электронов со спином вниз и вверх в приближении Хартри–Фока. Рассматривалась полоска конечной ширины по оси Ox и с периодическими граничными условиями по Oy. При определённых значениях параметров действительно происходит реконструкция края. Результаты численной диагонализации изображены на рисунках 3, 4, 5. Видно, что уровень Ферми пересекает разное количество краевых мод для спина вверх и спина вниз.

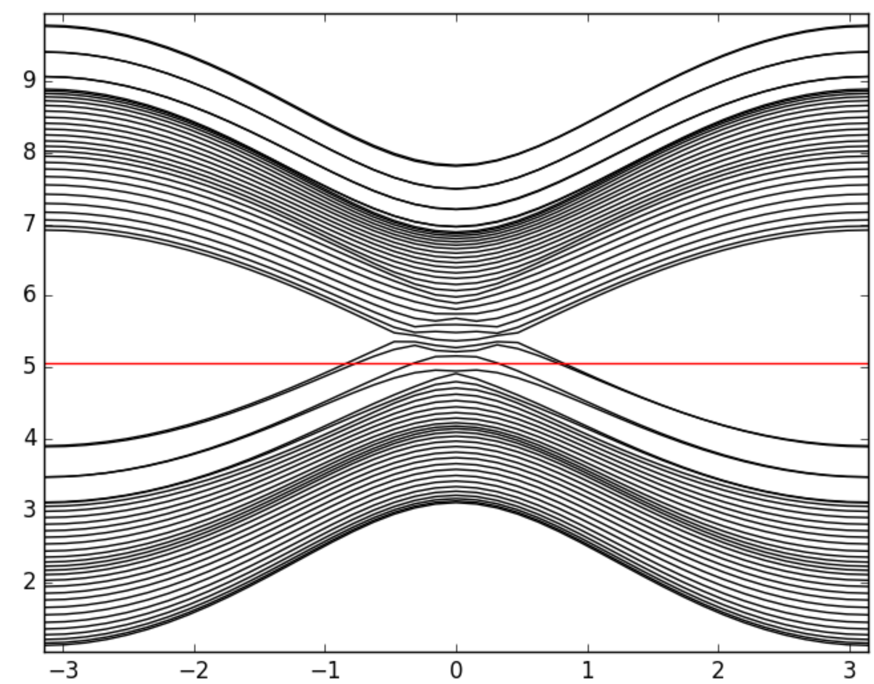

Рис. 4: Спектр электронов со спином вверх в самосогласованном потенциале. Красная линия означает уровень Ферми.

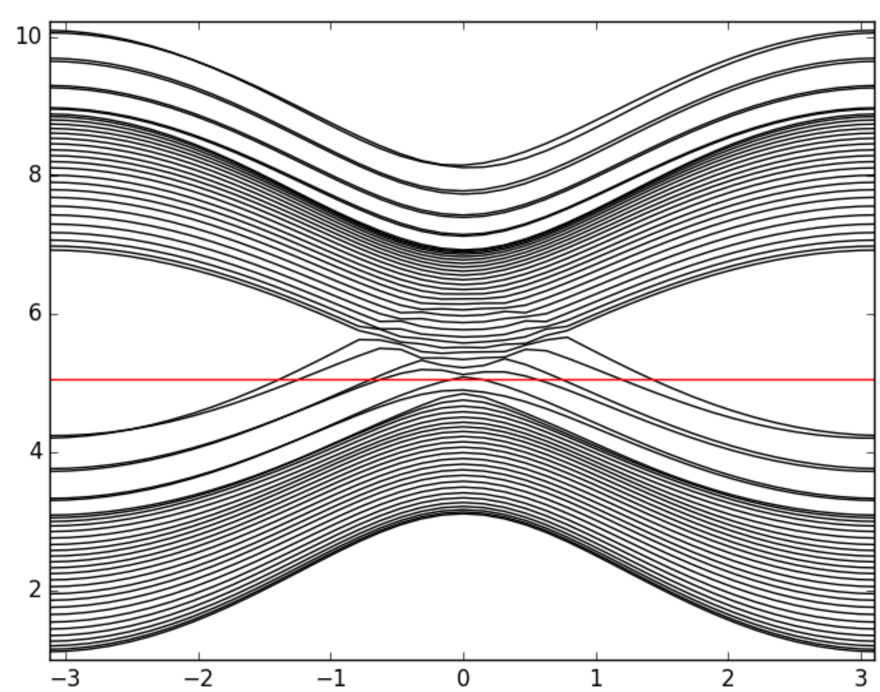

Рис. 5: Спектр электронов со спином вниз в самосогласованном потенциале. Красная линия означает уровень Ферми.

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] J. M. Luttinger. Quantum theory of cyclotron resonance in semiconductors: General theory. *Physical Review*, 102(4):1030–1041, May 1956.

[3] 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.

[4] Jianhui Wang, Yigal Meir, and Yuval Gefen. Spontaneous breakdown of topological protection in two dimensions. *Physical Review Letters*, 118(4), Jan 2017.