

# Некоторые сюжеты о топологических изоляторах

Anikin Evgeny, 128

27 марта 2017 г.

## 1 Уровни энергии на точечной примеси

Гамильтониан простейшего топологического изолятора может быть записан в виде

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

Уровни энергии —

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

Если перейти из импульсного представления в координатное, то он превратится в гамильтониан сильной связи. Гамильтониан примеси тогда можно записать в виде

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

Связанные состояния даются уравнением

$$\det \left[ \mathbb{1} - \Delta E \int \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} \frac{\omega + \hat{H}}{\omega^2 - E_p^2} \right] = 1 \quad (4)$$

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

$$\begin{cases} \int \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} \frac{\omega + \xi + \frac{1}{m}(2 - \cos p_x - \cos p_y)}{\omega^2 - E_p^2} = \frac{1}{\Delta E}, \\ \int \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} \frac{-\omega + \xi + \frac{1}{m}(2 - \cos p_x - \cos p_y)}{\omega^2 - E_p^2} = -\frac{1}{\Delta E}, \end{cases} \quad (5)$$

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

$$G(\omega, 0, 0)_{11} = -\frac{1}{8\pi} \frac{1}{m(4t^2 + \frac{\xi}{m})} \left[ p_{\max}^2 + \left( 2m(\omega + \xi) - \frac{\xi^2 - \omega^2}{4t^2 + \frac{\xi}{m}} \right) \log \left( 1 + \frac{\left( 4t^2 + \frac{\xi}{m} \right) p_{\max}^2}{\xi^2 - \omega^2} \right) \right] \quad (6)$$

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:

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

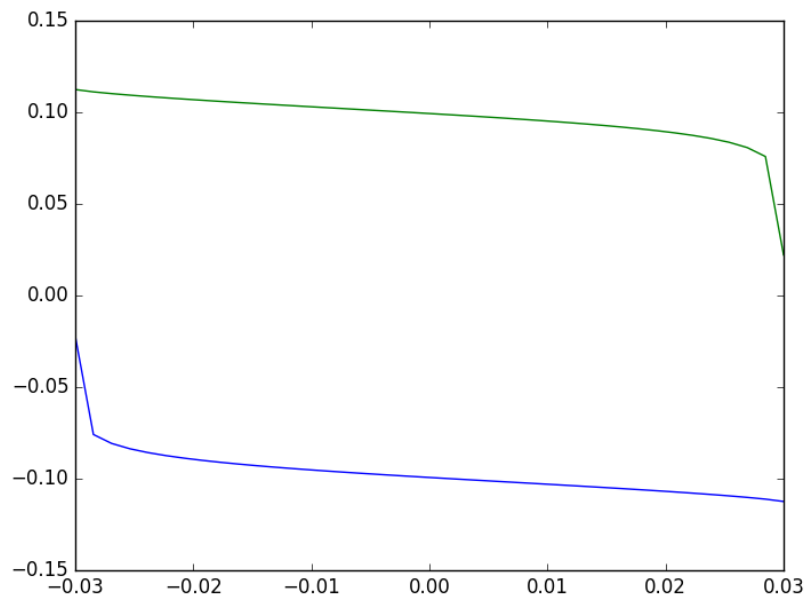


Рис. 1: Компоненты функций Грина

Здесь  $\alpha$  — “спинорный” индекс, а  $i$  — индекс, соответствующий номеру волновой функции.

Функция Грина —

$$G_0(x) = \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \frac{\omega + \hat{H}}{\omega^2 - E_p^2} e^{ipx} \quad (8)$$

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

$$F(x, y) \equiv \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \frac{e^{ip_x x + ip_y y}}{\omega^2 - E_p^2} \quad (9)$$

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

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

С другой стороны,  $F(x, y)$  может быть вычислена приближённо. Если разложить выражение в знаменателе около  $p = 0$  и распространить интегрирование до  $\infty$ , то получится сходящийся и берущийся интеграл.

$$F(x, y) \approx - \int \frac{p dp d\cos\theta}{(2\pi)^2} \frac{e^{ipr \cos\theta}}{\xi^2 - \omega^2 - (4t^2 + \frac{\xi}{m})p^2} = - \frac{1}{2\pi} \frac{1}{4t^2 + \frac{\xi}{m}} K_0 \left( \sqrt{\frac{\xi^2 - \omega^2}{4t^2 + \frac{\xi}{m}}} R \right) \quad (11)$$

Разности (10) можно аппроксимировать производными. Пользуясь тем, что  $K_0(x)$  — решение уравнения Бесселя, получим

$$\begin{aligned} G_{11} &= - \frac{1}{2\pi} \frac{1}{4t^2 + \frac{\xi}{m}} \left( \omega + \xi - \frac{1}{m} \frac{\xi^2 - \omega^2}{4t^2 + \frac{\xi}{m}} \right) K_0 \left( \sqrt{\frac{\xi^2 - \omega^2}{4t^2 + \frac{\xi}{m}}} R \right) \\ G_{21} &= \frac{it}{\pi} \sqrt{\frac{\xi^2 - \omega^2}{(4t^2 + \frac{\xi}{m})^3}} K'_0 \left( \sqrt{\frac{\xi^2 - \omega^2}{4t^2 + \frac{\xi}{m}}} R \right) e^{i\theta} \end{aligned} \quad (12)$$

### 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

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

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

As (14), (15) define a unitary transformation,  $p$  can be easily expressed via  $a$ .

The Hamiltonian is

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

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:

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

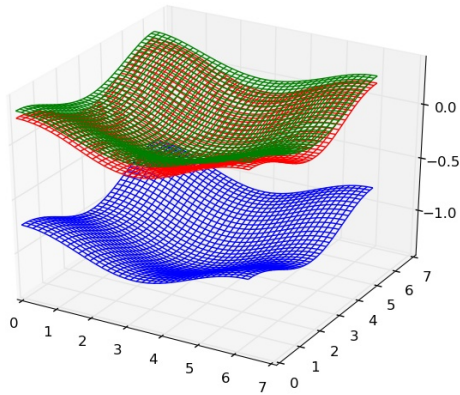


Рис. 2: Energy levels

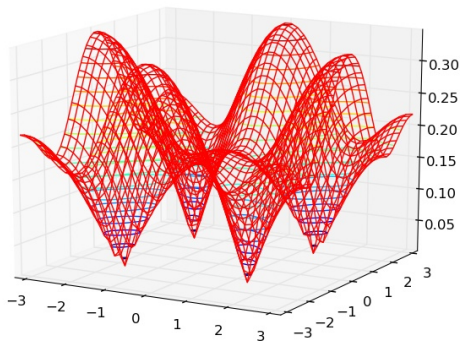


Рис. 3: The difference of two upper energy levels

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

$$T_b = \begin{pmatrix} t_1 & 0 & t_2 \\ 0 & t_3 & 0 \\ t_2 & 0 & t_1 \end{pmatrix} \quad (19)$$

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

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

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

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

For the arbitrary angle, as follows from 18,

$$T_\phi = \text{diag}(e^{-\frac{3i\phi}{2}}, e^{\frac{i\phi}{2}}, e^{\frac{i\phi}{2}}) \times T_x \times \text{diag}(e^{\frac{3i\phi}{2}}, e^{-\frac{i\phi}{2}}, e^{-\frac{i\phi}{2}}) =$$

$$= \begin{pmatrix} t_1 & \frac{1}{\sqrt{3}}t_2e^{-2i\phi} & \sqrt{\frac{2}{3}}t_2e^{-2i\phi} \\ \frac{1}{\sqrt{3}}t_2e^{2i\phi} & \frac{1}{3}(t_1 + 2t_3) & \frac{\sqrt{2}}{3}(t_1 - t_3) \\ \sqrt{\frac{2}{3}}t_2e^{2i\phi} & \frac{\sqrt{2}}{3}(t_1 - t_3) & \frac{1}{3}(2t_1 + t_3) \end{pmatrix} \quad (22)$$

The Hamiltonian is now

$$H = \text{diag}(0, 0, -\Delta E_{SO}) + 2 \cos p_x T_0 + 2 \cos p_y T_{\frac{\pi}{2}} +$$

$$+ 2 \cos(p_x + p_y) \tilde{T}_{\frac{\pi}{4}} + 2 \cos(p_x - p_y) \tilde{T}_{-\frac{\pi}{4}} + \dots \quad (23)$$

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 "entanglement" of these levels. As we treat the  $T$  matrices as a perturbation, we will find the eigenfunctions and eigenvalues of the restricted perturbation matrix  $V$ .

$$V = \begin{pmatrix} a & b \\ b^* & c \end{pmatrix}, \quad \text{where}$$

$$a = 2t_1(\cos p_x + \cos p_y) + 4\tilde{t}_1 \cos p_x \cos p_y,$$

$$b = \frac{2t_2}{\sqrt{3}}(\cos p_x - \cos p_y) + \frac{4i\tilde{t}_2}{\sqrt{3}} \sin p_x \sin p_y$$

$$c = \frac{2}{3}(t_1 + 2t_3)(\cos p_x + \cos p_y) + \frac{4}{3}(\tilde{t}_1 + 2\tilde{t}_3) \cos p_x \cos p_y \quad (24)$$

The eigenvalues are

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

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  $p_x, p_y$ :

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

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

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

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

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 behavior on a closed line (a small circle, for example) wrapping around the point  $(p_x, p_y) = (0, 0)$ . Obviously,  $e^{i\phi} = e^{-i \text{Arg } b}$ . At small  $p$ ,

$$b = \frac{t_2}{\sqrt{3}}(p_x^2 - p_y^2) + \frac{4i\tilde{t}_2}{3}p_x p_y + o(p^2) \quad (28)$$

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

$$b = \frac{t_2 p^2}{\sqrt{3}} \cos 2\alpha + \frac{2i\tilde{t}_2 p^2}{3} \sin 2\alpha + o(p^2) \quad (29)$$

Now it is obvious that the phase of  $e^{i\phi}$  changes by  $4\pi$  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.

$$\begin{aligned}
 H = \sum & (E_s + 4t_s)s_{mn}^\dagger s_{mn} - t_s s_{mn}^\dagger (s_{m+1,n} + s_{m-1,n} + s_{m,n+1} + s_{m,n-1}) \\
 & + t_{sp} s_{mn}^\dagger (-p_{m+1,n}^x + p_{m-1,n}^x - p_{m,n+1}^y + p_{m,n-1}^y) + \text{h.c.} \\
 & + (p_{mn}^x)^\dagger (t_{\parallel} (p_{m+1,n}^x + p_{m-1,n}^x) + t_{\perp} (p_{m,n+1}^x + p_{m,n-1}^x)) \\
 & + (p_{mn}^x)^\dagger (t_{\perp} (p_{m+1,n}^y + p_{m-1,n}^y) + t_{\parallel} (p_{m,n+1}^y + p_{m,n-1}^y)) \\
 & + (p_{mn}^z)^\dagger t_3 (p_{m+1,n}^z + p_{m-1,n}^z + p_{m,n+1}^z + p_{m,n-1}^z) \\
 & - \frac{E_{SO}}{3} \begin{pmatrix} p_x^\dagger & p_y^\dagger & p_z^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & i & -1 \\ -i & 1 & i \\ -1 & -i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix} \quad (30)
 \end{aligned}$$

## 5 Реконструкция края

В данном разделе рассматривается реконструкция края (аналогично [1]) в модели сильной связи из [2].

## Список литературы

- [1] Jianhui Wang, Yigal Meir, and Yuval Gefen. Spontaneous breakdown of topological protection in two dimensions. *Physical Review Letters*, 118(4), Jan 2017.
- [2] 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.