

МОСКОВСКИЙ ФИЗИКО–ТЕХНИЧЕСКИЙ
ИНСТИТУТ

КАФЕДРА ПРОБЛЕМ ФИЗИКИ И АСТРОФИЗИКИ

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА НА
СТЕПЕНЬ МАГИСТРА

Краевые состояния в
топологических изоляторах с
беспорядком

Аникин Е. В.

научный руководитель
чл.-к. РАН д. ф-м. н. П.И. АРСЕЕВ

1 июля 2017 г.

Содержание

1	Введение	2
2	Топологический изолятор на основе квантовой ямы HgTe	3
2.1	Эффективный гамильтониан	3
3	Квантовая яма CdTe–HgTe–CdTe в модели сильной связи	4
3.1	Модель однородного полупроводника	4
3.2	Модель квантовой ямы	5
4	Топологический инвариант	5
5	Модель сильной связи для топологического изолятора	8
5.1	Почему ВNZ–модель описывает топологический изолятор	9
5.2	Краевые состояния	9
6	Точечная примесь	10
7	Проводимость полосы топологического изолятора в форма- лизме Ландауэра–Буттикера	12
8	Заключение	16
A	Уровни размерного квантования в квантовой яме HgTe в $k \cdot p$ методе	17
B	Отсутствие рассеяния для крамерсовского дублета	17
C	Вычисления для точечной примеси	18
C.1	Энергия связанного состояния	18
C.2	Волновая функция связанного состояния	18
D	Задача рассеяния	19

Аннотация

Для двумерного топологического изолятора в модели сильной связи найден спектр одиночной примеси; численно исследована проводимость в присутствии примесей в формализме Ландауэра–Буттикера.

1 Введение

Двумерные топологические изоляторы — это материалы с особого рода зонной структурой: в них невозможно однозначно задать фазу функций Блоха во всей зоне Бриллюэна. Причина этого в том, что (в простейшем случае) отличен от нуля топологический инвариант [1, 2], выражающийся через функцию Блоха $u(k_x, k_y)$:

$$N = \frac{1}{2\pi i} \int d^2k \left[\frac{\partial}{\partial k_x} \left\langle u \left| \frac{\partial u}{\partial k_y} \right\rangle - \frac{\partial}{\partial k_y} \left\langle u \left| \frac{\partial u}{\partial k_x} \right\rangle \right] \quad (1)$$

В реалистичном случае этот инвариант отличен от нуля для каждой из компонент спина, но имеет для них противоположные знаки. Этот инвариант определяет спин–холловскую проводимость, измеренную в квантах магнитного потока:

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

Наконец, точно так же, как в эффекте Холла, на границе топологических изоляторов всегда возникают краевые состояния, пересекающие запрещённую зону, см. [3].

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. Поэтому эти состояния не могут рассеиваться друг в друга под действием какого-либо Т-инвариантного возмущения, то есть граница топологического изолятора представляет из себя идеальный одномерный проводник.

В многочисленных экспериментах (например, [4], [5]) показано, что квантовая яма HgTe является топологическим изолятором при некоторых параметрах. Наличие краевых состояний подтверждается измерениями нелокального сопротивления. Однако, хотя краевые состояния и определяют транспорт в квантовой яме, этот транспорт оказывается не баллистическим [5]. Поэтому представляют интерес механизмы, которые могут приводить к рассеянию краевых мод друг в друга, либо иные механизмы, приводящие к неидеальности краевого транспорта.

Целью настоящей работы является исследование влияния глубоких примесей на краевой транспорт. Имеются в виду такие примеси, для которых энергия связанного состояния лежит внутри щели. Это, казалось бы, открывает возможность переходов краевых состояний в примесные и наоборот, и может приводить к изменению проводимости. Этот вопрос можно исследовать в формализме Ландауэра–Буттикера. В рамках этого формализма к топологическому изолятору присоединяются идеальные контакты, и вычисляется матрица рассеяния для электронных состояний в контактах. Для таких вычислений существуют эффективные численные методы и готовые библиотеки (в нашей работе используется библиотека Kwant [6]).

Работа организована следующим образом. В разделах 2,4,5 изложены основные факты о топологических изоляторах. В частности, показано, как возникает эффективный гамильтониан, что представляет из себя топологический инвариант и каков спектр краевых состояний. В разделе 3 представлены

модель сильной связи для полупроводника со спин–орбитальным взаимодействием и модель квантовой ямы на её основе, которые очень помогли автору разобраться в $k \cdot p$ модели. В разделе 6 исследована точечная примесь в топологическом изоляторе, а в разделе 7 представлены результаты численного моделирования проводимости в присутствии беспорядка.

2 Топологический изолятор на основе квантовой ямы HgTe

2.1 Эффективный гамильтониан

Хотя впервые предложенный топологический изолятор — графен [7], первая экспериментальная реализация топологического изолятора — квантовая яма CdTe–HgTe–CdTe. Она представляет собой узкий (несколько нанометров) двумерный слой HgTe, заключённый между CdTe. Как CdTe, так и HgTe — вещества с сильным спин–орбитальным взаимодействием, которое приводит к расщеплению р–зоны. Образуются зоны лёгких и тяжёлых дырок, которые вместе преобразуются как момент $3/2$, и отщеплённая зона с моментом $1/2$, которая лежит ниже по энергии. Отличие CdTe и HgTe — в положении s–зоны. В CdTe она является зоной проводимости и лежит выше лёгких и тяжёлых дырок. HgTe обладает инвертированной зонной структурой: s–зона лежит ниже тяжёлых и лёгких дырок. Из-за этого HgTe — полуметалл.

В квантовой яме вместо трёхмерного спектра HgTe возникают двумерные уровни размерного квантования, которые можно найти, используя гамильтониан Кейна [8]. Это было впервые сделано в [9]. Мы повторили их вычисления, они приведены в приложении А. При малой толщине ямы «доминирует» спектр CdTe, поэтому зонная структура ямы нормальная: E1–подуровень размерного квантования выше HH1 подуровня. Однако в некоторый момент происходит их пересечение, после чего они меняются местами. Когда уровни размерного квантования близки друг к другу, их можно описывать с помощью эффективного $k \cdot p$ гамильтониана. Оказывается, что этот эффективный гамильтониан описывает топологический изолятор.

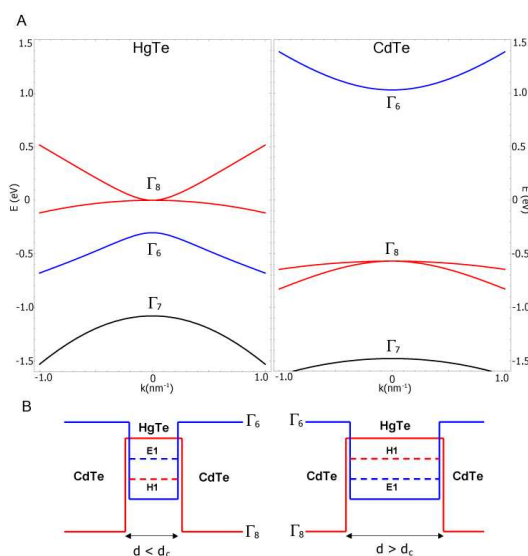


Рис. 1: Объемный спектр HgTe и CdTe и схематическое изображение квантовой ямы

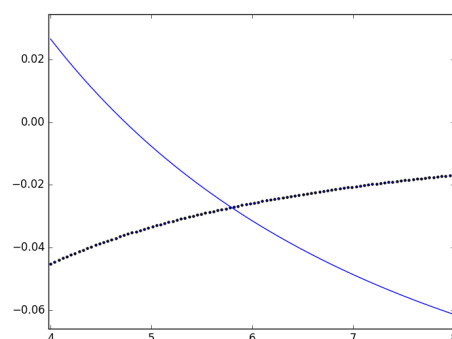


Рис. 2: Уровни размерного квантования

Эффективный гамильтониан (с учётом спинов) принимает вид

$$H = \frac{p^2}{2m_0} \mathbb{1} + \begin{pmatrix} \xi + \frac{p^2}{2m} & v(p_x - ip_y) & 0 & 0 \\ v(p_x + ip_y) & -\xi - \frac{p^2}{2m} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \xi + \frac{p^2}{2m} & v(p_x + ip_y) \\ 0 & 0 & v(p_x - ip_y) & -\xi - \frac{p^2}{2m} \end{pmatrix} \quad (3)$$

Спектр этого гамильтониана,

$$\epsilon = \frac{p^2}{2m_0} \pm \sqrt{\left(\xi + \frac{p^2}{2m}\right)^2 + v^2 p^2}, \quad (4)$$

при малых p является дираковским, где щель ξ играет роль массы, а «скорость света» равна $\sqrt{v^2 + \frac{\xi}{m}} \approx v$.

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

В этом разделе будет построена модель сильной связи, эквивалентная $k \cdot p$ гамильтониану (28). Численно диагонализуя её, можно независимо получить уровни размерного квантования.

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 проекциями 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.

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 взаимодействие 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 их выражений через коэффициенты Клебша–Гордана.

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 .

$$H_{\text{full}} = \begin{pmatrix} H_c & T \\ T^\dagger & H_v \end{pmatrix}, \quad (5)$$

Матрицы H_c , T , H_v определены формулами (8)–(8), см. стр. 7. Этот гамильтониан можно разложить по малым p , в результате чего получится гамильтониан

Латтинжера:

$$H_v = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \left\{ - \left(\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma_2 \right) k^2 + 2\gamma_2(k_x^2 J_x^2 + k_y^2 J_y^2 + k_z^2 J_z^2) + \right. \\ \left. + 4\gamma_3(k_x k_y J_x J_y + k_x k_z J_x J_z + k_y k_z J_y J_z) \right\} \quad (6)$$

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

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2ma^2} \gamma_1 &= \frac{1}{3} t_{\parallel} \\ \frac{\hbar^2}{2ma^2} \gamma_2 &= \frac{1}{6} (t_{\parallel} - t_{\perp}) \\ \gamma_3 &= 0 \end{aligned} \quad (7)$$

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 [10].

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 диагонализировать 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.

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 (11), переходящие друг в друга при обращении времени. ξ из гамильтониана (11) — 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 [9], это происходит при толщине ямы, равной 6.4 nm. У меня получилось, что критическая толщина равна ≈ 7.5 nm.

4 Топологический инвариант

Кратко изложим, что представляет из себя TKNN-инвариант для произвольного зонного гамильтониана. 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.

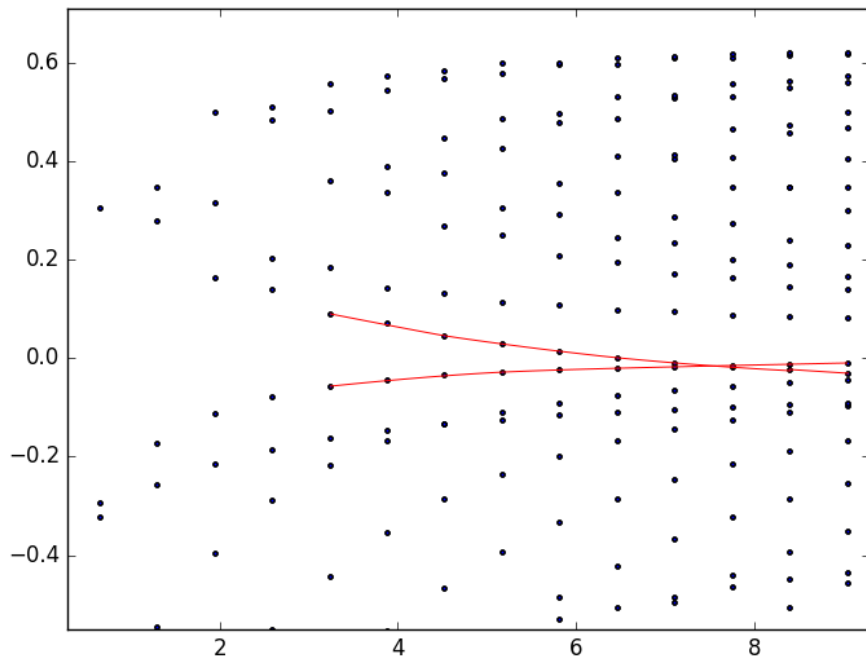


Рис. 3: На графике изображены уровни размерного квантования, полученные численной диагонализацией, для $k_x, k_y = 0$ в зависимости от толщины слоя HgTe, nm. Видно, что два уровня размерного пересекаются при $d \approx 7.5$.

$$H_c = (E_s + \frac{1}{m_s}(3 - \cos p_x - \cos p_y - \cos p_z))I_{2 \times 2} \tag{8}$$

$$T = P \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}}(\sin p_x + i \sin p_y) & \sqrt{\frac{2}{3}} \sin p_z & \frac{1}{\sqrt{6}}(\sin p_x - i \sin p_y) & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}}(\sin p_x + i \sin p_y) & \sqrt{\frac{2}{3}} \sin p_z & \frac{1}{\sqrt{2}}(\sin p_x - i \sin p_y), \end{pmatrix}, \tag{8}$$

$$H_v = \begin{pmatrix} (t_{\parallel} + t_{\perp})(\cos p_x + \cos p_y) + 2t_{\perp} \cos p_z & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}(t_{\parallel} - t_{\perp})(\cos p_x - \cos p_y) & -\frac{1}{\sqrt{3}}(t_{\parallel} - t_{\perp})(\cos p_x - \cos p_y) \\ 0 & \left(\frac{t_{\parallel}}{3} + \frac{5t_{\perp}}{3}\right)(\cos p_x + \cos p_y) + \left(\frac{2t_{\perp}}{3} + \frac{4t_{\parallel}}{3}\right)\cos p_z & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}(t_{\parallel} - t_{\perp})(\cos p_x - \cos p_y) \\ -\frac{1}{\sqrt{3}}(t_{\parallel} - t_{\perp})(\cos p_x - \cos p_y) & 0 & \left(\frac{t_{\parallel}}{3} + \frac{5t_{\perp}}{3}\right)(\cos p_x + \cos p_y) + \left(\frac{2t_{\perp}}{3} + \frac{4t_{\parallel}}{3}\right)\cos p_z & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}(t_{\parallel} - t_{\perp})(\cos p_x - \cos p_y) & 0 & (t_{\parallel} + t_{\perp})(\cos p_x + \cos p_y) + 2t_{\perp} \cos p_z \end{pmatrix} \tag{8}$$

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

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

Определим число Черна, иначе называемое TKNN-инвариант (см. [1, 2]), как

$$N = \frac{1}{2\pi} \int_{\gamma} d\phi \quad (9)$$

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

$$N = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} \langle u_a | \vec{\nabla}_k u_a \rangle - \langle u_b | \vec{\nabla}_k u_b \rangle d\vec{k} = \frac{1}{2\pi i} \int d^2k [\partial_x \langle u | \partial_y u \rangle - \partial_y \langle u | \partial_x u \rangle] \quad (10)$$

В последнем интеграле подынтегральное выражение калибровочно-инвариантно, что позволяет опустить индексы a, b .

5 Модель сильной связи для топологического изолятора

Можно написать гамильтониан сильной связи, известный как модель BNZ (Bernevig, Hughes, Zhang, см. [9]), эквивалентный эффективному $k \cdot p$ гамильтониану топологического изолятора. Блок для одной компоненты спина будет иметь следующий вид (для простоты предполагается симметрия зон):

$$H = \begin{pmatrix} \xi + \frac{1}{m}(2 - \cos p_x - \cos p_y) & 2t(\sin p_x - i \sin p_y) \\ 2t(\sin p_x + i \sin p_y) & -\xi - \frac{1}{m}(2 - \cos p_x - \cos p_y) \end{pmatrix} \quad (11)$$

Спектр этого гамильтониана несложно вычислить:

$$E_p^2 = \left(\xi + \frac{1}{m}(2 - \cos p_x - \cos p_y) \right)^2 + 4t^2(\sin^2 p_x + \sin^2 p_y) \quad (12)$$

Как видно, гамильтониан описывает две симметричные зоны, щель между которыми равна $2|\xi|$. При малых k $E_p^2 = \xi^2 + (4t^2 + \xi/m)k^2$, то есть спектр дираковский.

В координатном (решёточном) представлении гамильтониан выглядит так:

$$H_{\text{lattice}} = \sum_{mn} \left\{ a_{mn}^\dagger \left(\left(\xi + \frac{2}{m} \right) a_{mn} - \frac{1}{2m} (a_{m+1,n} + a_{m-1,n} + a_{m,n+1} + a_{m,n-1}) \right) \right. \\ \left. - ita_{mn}^\dagger (b_{m+1,n} - b_{m-1,n} - i(b_{m,n+1} - b_{m,n-1})) \right. \\ \left. - itb_{mn}^\dagger (a_{m+1,n} - a_{m-1,n} + i(a_{m,n+1} - a_{m,n-1})) \right. \\ \left. - b_{mn}^\dagger \left(\left(\xi + \frac{2}{m} \right) b_{mn} - \frac{1}{2m} (b_{m+1,n} + b_{m-1,n} + b_{m,n+1} + b_{m,n-1}) \right) \right\} \quad (13)$$

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

5.1 Почему ВNZ–модель описывает топологический изолятор

Покажем, что модель (11) действительно описывает топологический изолятор, то есть для неё отличен от нуля TKNN–инвариант.

Для определённости рассмотрим зону с $E > 0$. Для волновой функции в этом случае существуют две калибровки, $u(p)$ и $v(p)$:

$$u(p) = \frac{1}{\sqrt{(E_p + \xi + \frac{2}{m}(2 - \cos p_x - \cos p_y))^2 + 4t^2(\sin^2 p_x + \sin^2 p_y)}} \times \begin{pmatrix} \xi + \frac{2}{m}(2 - \cos p_x - \cos p_y) \\ 2t(\sin p_x + i \sin p_y) \end{pmatrix} \quad (14)$$

$$v(p) = \frac{1}{\sqrt{(E_p - \xi - \frac{2}{m}(2 - \cos p_x - \cos p_y))^2 + 4t^2(\sin^2 p_x + \sin^2 p_y)}} \times \begin{pmatrix} -2t(\sin p_x + i \sin p_y) \\ \xi + \frac{2}{m}(2 - \cos p_x - \cos p_y) \end{pmatrix} \quad (15)$$

Легко видеть, что если $\xi > 0$, то $u(p)$ определена для всей зоны Бриллюэна, и, следовательно, TKNN–инвариант обращается в ноль. Напротив, если $\xi < 0$, то $u(p)$ не определена при $p = (0, 0)$, а $v(p)$ — при $p = (\pi, \pi)$. При близких к нулю p $u(p)$ приближённо равна

$$u(p) \approx \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{p_x + ip_y}{\sqrt{p_x^2 + p_y^2}} \end{pmatrix} \quad (16)$$

а $v(p)$ —

$$v(p) \approx \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (17)$$

Таким образом, $u(p) = v(p)e^{i\phi}$. В соответствии с определением (9), следовательно, топологический инвариант равен 1 (набег фазы равен 2π).

5.2 Краевые состояния

Несмотря на то, что у топологического изолятора есть щель в объёмном спектре, на его границе возникают киральные краевые состояния, пересекающие щель. На рис. 4 изображён спектр полосы топологического изолятора, полученный прямой диагонализацией. Видно, что кроме густой полосы уровней, соответствующих объёмным состояниям, есть уровни, пересекающие щель. Состояния с различными спинами образуют крамерсовский дублет и движутся в противоположных направлениях. Поэтому никакое Т–инвариантное возмущение не может привести к их рассеянию друг в друга, см. приложение В. При отсутствии рассеяния край топологического изолятора ведёт себя как идеальный провод: состояния не будут локализованы.

Волновые функции краевых состояний экспоненциально убывают при удалении от края. Экспоненту, определяющую убывание, можно найти из дисперсионного соотношения. При малых k $k = \frac{1}{v}\sqrt{E^2 - \xi^2}$, следовательно, при $|E| < |\xi|$ показатель экспоненты — $\kappa = \frac{1}{v}\sqrt{\xi^2 - E^2}$. Таким образом, характерный масштаб длин для краевых состояний — $\frac{v}{\xi}$.

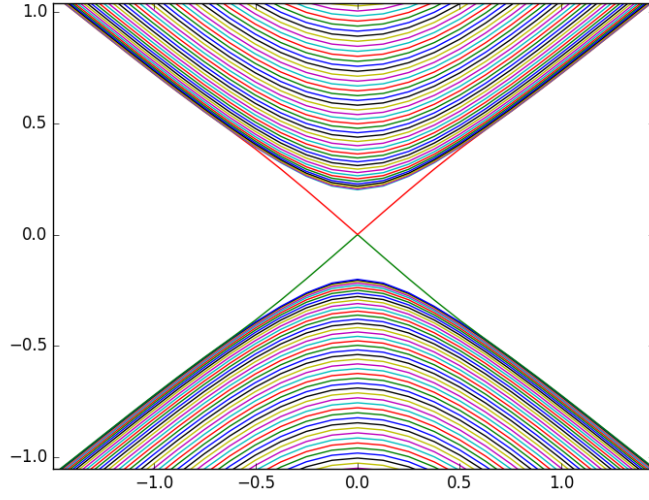


Рис. 4: Спектр полосы топологического изолятора: результат численной диагонализации полосы конечной ширины. Две ветви соответствуют состояниям на разных краях топологического изолятора. Перекрывание этих состояний экспоненциально мало.

6 Точечная примесь

Мы рассмотрели примесь, описываемую в подходе сильной связи гамильтонианом

$$V = \Delta E(a_{00}^\dagger a_{00} + b_{00}^\dagger b_{00}) \quad (18)$$

Для такой примеси можно найти уравнения, определяющие уровни энергии, а также, в некотором приближении, волновые функции.

Связанные состояния даются уравнением

$$\det \left(\mathbb{1} - \Delta E \hat{G}(\omega, 0, 0) \right) = 1, \quad (19)$$

где \hat{G} — функция Грина топологического изолятора:

$$\hat{G}(\omega, m, n) = \int \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} e^{ip_x m + ip_y n} \frac{\omega \cdot \mathbb{1} + \hat{H}}{\omega^2 - E_p^2}, \quad (20)$$

\hat{H} — матрица (11). В последнем интеграле недиагональные члены из-за симметрии обращаются в ноль, и остаются два уравнения, неявно определяющие уровни энергии через интегралы по $d^2 k$.

Волновые функции связанных состояний даются компонентами свободной функции Грина:

$$\Psi_{\alpha, i}(x) = G_0(\omega, x)_{\alpha i} \quad (21)$$

Здесь α — “спинорный” индекс, i — индекс, соответствующий номеру волновой функции, $x = (m, n)$.

Получается, что как уровни энергии, так и волновые функции выражаются (явно или неявно) через функцию Грина. Последнюю можно всегда найти численно, кроме того, мы получили для неё приближённые формулы при условии $\xi \ll t, \frac{1}{m}$ (детали — в приложении С.1)

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

$$p_{\max} \sim 1 \quad \text{— обрезание на векторе обратной решётки} \quad (22)$$

Для $R = \sqrt{m^2 + n^2} \gg 1$

$$G_{11}(\omega, m, n) = -\frac{1}{2\pi} \frac{1}{4t^2 + \frac{\xi}{m}} \left(\omega + \xi - \frac{1}{m} \frac{\xi^2 - \omega^2}{4t^2 + \frac{\xi}{m}} \right) K_0 \left(\sqrt{\frac{\xi^2 - \omega^2}{4t^2 + \frac{\xi}{m}}} R \right)$$

$$G_{21}(\omega, m, n) = -\frac{it}{\pi} \sqrt{\frac{\xi^2 - \omega^2}{(4t^2 + \frac{\xi}{m})^3}} K_1 \left(\sqrt{\frac{\xi^2 - \omega^2}{4t^2 + \frac{\xi}{m}}} R \right) e^{i\theta} \quad (23)$$

С помощью этих выражений можно получить интересное физическое следствие: оказывается, для топологического изолятора состояния в щели существуют для сколь угодно *глубокого* потенциала. Их можно представлять себе как краевые состояния, движущиеся вокруг примеси. Энергии этих состояний экспоненциально близки к краю зоны по параметру $1/(m|\xi|)$. Для обычного изолятора, то есть для $\xi > 0$, состояний в щели для глубокой ямы не существует.

Энергия связанного состояния для топологического изолятора $\omega = \xi + \delta\omega$ при условии $\delta\omega \ll |\xi|$ тоже найдена аналитически:

$$\delta\omega \approx \frac{\left(4t^2 + \frac{\xi}{m} \right) p_{\max}^2}{|\xi|} \exp \left\{ -\frac{p_{\max}^2}{4m|\xi|} - \frac{2\pi}{|\xi|\Delta E \left(4t^2 + \frac{\xi}{m} \right)} \right\} \quad (24)$$

Отсюда видна экспоненциальная малость $\delta\omega$.

На рисунках изображены численно найденные уровни энергии для разных параметров гамильтониана. Мы проверили, что экспоненциальные «хвосты» для них хорошо описываются формулой (24)



Рис. 5: На графиках показаны уровни энергии связанных состояний на точечной примеси для $m, t = 1, 0.4$, $\xi = 0.03$ (слева), $\xi = 0.3$ (справа). По оси абсцисс отложена обратная глубина ямы, ΔE^{-1} . Видно, что при бесконечной глубине ямы имеются два слабо связанных состояния.

Заметим, что при определённых энергиях примеси связанные состояния лежат в середине зоны. Это значит, что они могут перекрываться с краевыми состояниями.

7 Проводимость полосы топологического изолятора в формализме Ландауэра–Буттикера

Проводимость полосы можно вычислять в формализме Ландауэра–Буттикера, как это делается, например, в [11]. А именно, для системы, состоящей из полосы топологического изолятора и присоединённых к ней бесконечных контактов, решается задача рассеяния. Проводимость даётся формулой Ландауэра:

$$G = \frac{2se^2}{2\pi\hbar} \text{Tr } \hat{t}^\dagger \hat{t} \quad (25)$$

Здесь \hat{t} — матрица рассеяния из одного контакта в другой.

Задача рассеяния в такой постановке может быть эффективно решена численно (см. приложение D). Для этого существует библиотека Kwant [6] для языка программирования Python.

Мы рассматривали контакты, описываемые гамильтонианом

$$H_{\text{Lead}} = \sum_i (E + 4t) c_i^\dagger a_i - \sum_{\langle i,j \rangle} t c_i^\dagger c_j \quad (26)$$

Они соединялись с топологическим изолятором посредством членов $c_i^\dagger a_{j,\sigma}$, где c — операторы контакта, а a — топологического изолятора.

Параметры задачи в этих симуляциях фиксированы следующим образом:

$$\begin{aligned} \xi &= -30 \text{ meV} \\ m^{-1} &= 78.4 \text{ meV} \\ t &= 72.9 \text{ meV} \end{aligned} \quad (27)$$

В [11] (а также в многих других работах) исследуется зависимость проводимости бруска от беспорядка. Беспорядок реализовывался следующим образом: к энергии каждого узла добавлялась случайная величина, равномерно распределённая в $[-W/2, W/2]$ (W — амплитуда беспорядка). При энергии, лежащей в щели, зависимость проводимости от амплитуды беспорядка показана на рис. 6. Видно, что проводимость начинает уменьшаться только при очень большой амплитуде беспорядка, сравнимой с характерной энергией связи между узлами. Однако в [11] не показано, как отличается плотность состояний неупорядоченного топологического изолятора от идеального. Было бы логично предположить, что падение сопротивления начинается в тот момент, когда из-за беспорядка появляется достаточное количество состояний в щели и происходит гибридизация краевых состояний с примесными.

Мы провели аналогичные симуляции, одновременно вычисляя плотность состояний топологического изолятора для различных амплитуд беспорядка. Кроме того, мы пробовали реализовывать беспорядок несколько по-другому. А именно, к каждому узлу с малой вероятностью p добавлялась случайная величина, где W с самого начала не мало. Это можно интерпретировать как добавление небольшого количества примесей. Такой способ задания беспорядка отличается от «классического» тем, что даже при малой концентрации примесей появляется ненулевая плотность состояний внутри щели.

Для различных реализаций беспорядка мы вычисляли зависимость проводимости от энергии Ферми, а также плотность состояний с помощью прямой диагонализации. При отсутствии или малом значении беспорядка (или малой концентрации примесей) наблюдались чётко выраженные плато в зависимости проводимости от энергии.

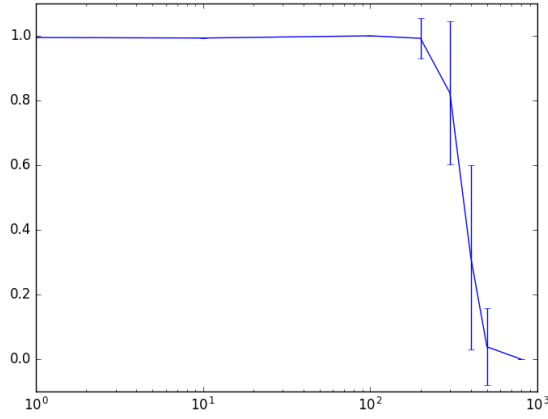


Рис. 6: Зависимость проводимости полосы топологического изолятора от силы беспорядка

Оказалось, что отсутствие щели в объёмной плотности состояний не обязательно приводит к исчезновению плато проводимости. Для «обычного» беспорядка плато исчезают и сменяются хаотическими флуктуациями не в тот момент, когда исчезает щель, а при гораздо более сильном беспорядке, когда близок к исчезновению минимум в плотности состояний, соответствующий щели. Добавление малого количества «глубоких» примесей (при концентрации меньше 0.03) тоже не приводит к исчезновению плато. Что замечательно, стабильность плато сильно зависит от толщины полосы топологического изолятора. Чем уже полоса, тем при меньшем беспорядке исчезает плато.

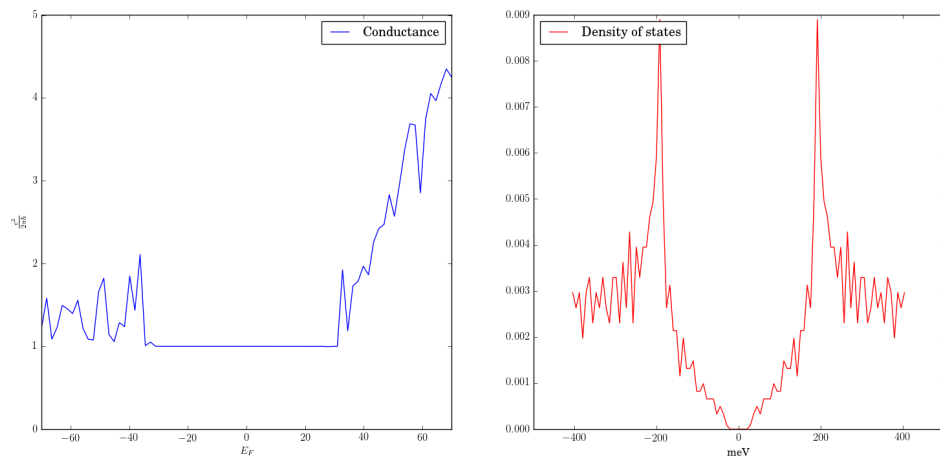


Рис. 7: В отсутствие беспорядка в щели наблюдается плато проводимости $G = \frac{e^2}{2\pi\hbar}$, а плотность состояний равна нулю.

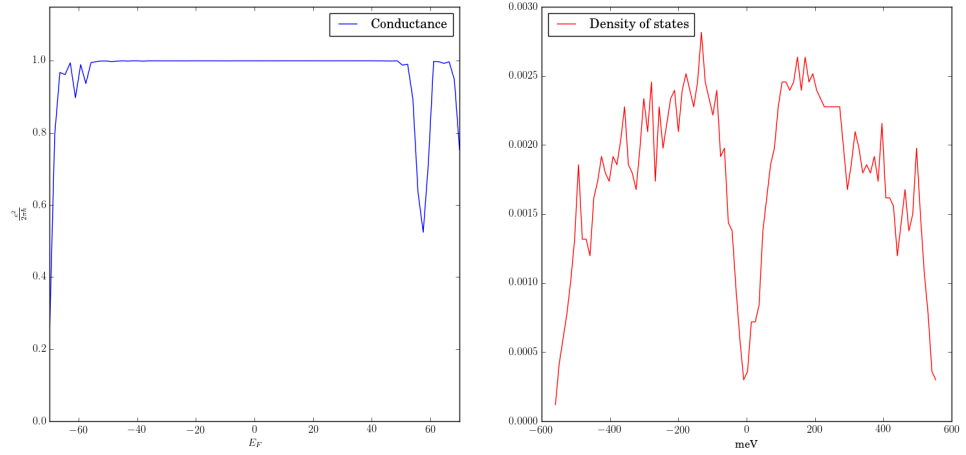


Рис. 8: На данном рисунке сила беспорядка равна 240meV . Видно, что плато сохраняется, несмотря на ненулевую плотность состояний в щели.

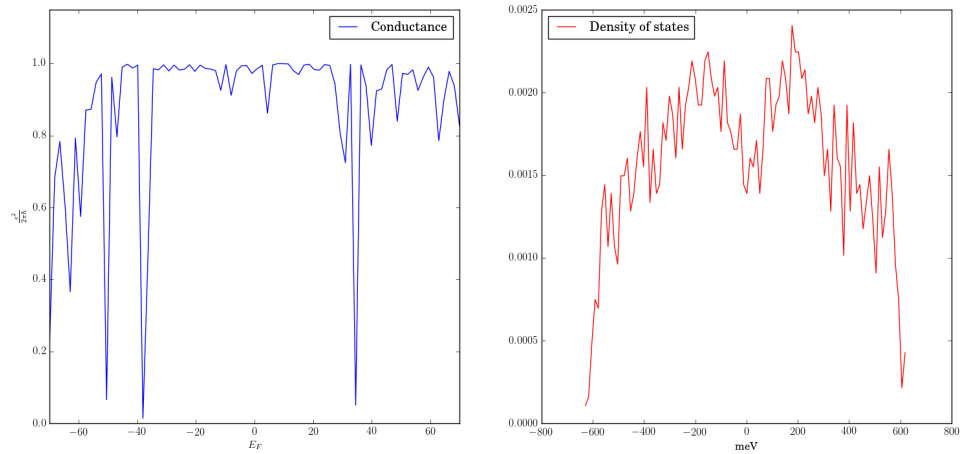


Рис. 9: При ещё большей амплитуде беспорядка ($W = 320\text{meV}$) проводимость начинает флуктуировать, но плато всё равно хорошо различимо. Дальнейшее увеличение W приводит к нарастанию флуктуаций, а в дальнейшем — к исчезновению плато.

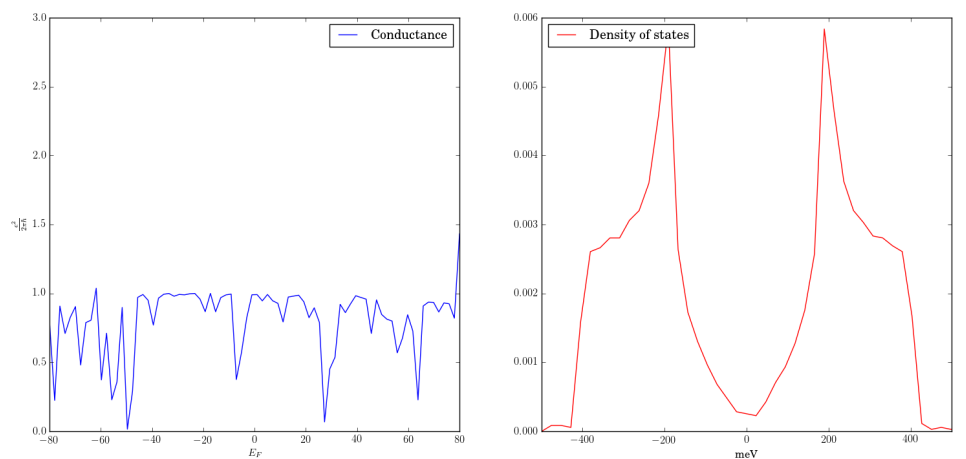


Рис. 10: Случайные глубокие примеси с концентрацией $n = 0.03$, толщина полосы — 50 узлов

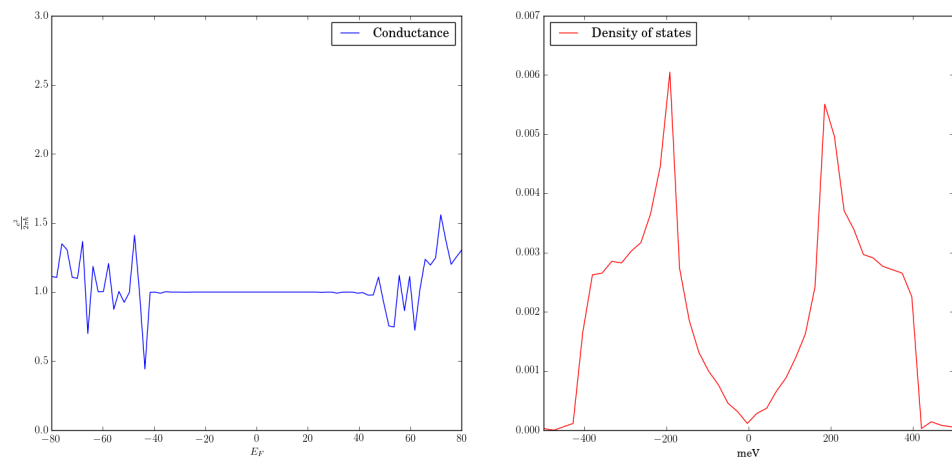


Рис. 11: Случайные глубокие примеси с концентрацией $n = 0.03$, толщина полосы — 100 узлов

8 Заключение

Мы исследовали влияние беспорядка на краевые состояния топологического изолятора в ВNZ-модели, гамильтониан которой — эффективный двухуровневый гамильтониан для зон размерного квантования в яме CdTe–HgTe–CdTe. Был рассмотрен не только слабый потенциальный беспорядок, но и беспорядок в виде глубоких редко расположенных примесей, создающих ненулевую плотность состояний в щели. Для отдельно взятой примеси был найден спектр связанных состояний: оказалось, что для достаточно глубокой примеси возникают два связанных состояния, одно из которых при определённой глубине примеси может лежать в середине зоны, тем самым давая вклад в плотность состояний. Именно такие примеси использовались для численного моделирования полосы топологического изолятора в формализме Ландауэра–Буттикера. Оказалось, что краевые состояния оказываются устойчивыми не просто к слабому потенциальному беспорядку, но и к беспорядку, создающему ненулевую плотность состояний в щели.

А Уровни размерного квантования в квантовой яме HgTe в $k \cdot p$ методе

Гамильтониан Кейна имеет вид

$$H = \begin{pmatrix} E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_s} E_{2 \times 2} & T \\ T^\dagger & E_v + H_L \end{pmatrix} \quad (28)$$

$$H_L = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\left(\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma_2 \right) k^2 - 2\gamma_2 (\vec{k} \cdot \vec{J})^2 - 2(\gamma_3 - \gamma_2)(\{J_x J_y\} + \{J_x J_z\} + \{J_y J_z\}) \right]$$

$$T = P \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}}k_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}k_z & \frac{1}{\sqrt{6}}k_- & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}}k_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}k_z & \frac{1}{\sqrt{2}}k_- \end{pmatrix}$$

Так как коэффициенты в гамильтониане Кейна зависят явным образом от z , нужно сделать замену $k_z \rightarrow i\partial_z$. При этом, чтобы гамильтониан остался эрмитовым, $\frac{k_z^2}{2m} \rightarrow -\partial_z \frac{1}{2m} \partial_z$ (и аналогично — для других членов). Все величины, зависящие от z , равны значениям для HgTe при $-d/2 < z < d/2$, для CdTe — в противном случае.

Уровни размерного квантования можно относительно просто найти для $k_x, k_y = 0$. В этом случае гамильтониан значительно упрощается. Уровни тяжёлых дырок оказываются полностью отщеплёнными для каждой проекции спина и описываются эффективным гамильтонианом

$$H_{\text{HH}} = E_v(z) + \frac{1}{2m} \frac{\partial}{\partial z} (\gamma_1(z) - 2\gamma_2(z)) \frac{\partial}{\partial z} \quad (29)$$

Также отщепляются s -зона вместе с зоной лёгких дырок. Они описываются эффективным гамильтонианом

$$H_{\text{s,LH}} = \begin{pmatrix} E_c - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial z} (1 + 2F) \frac{\partial}{\partial z} & \sqrt{\frac{2}{3}} P k_z \\ \sqrt{\frac{2}{3}} P k_z & E_v + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial z} (\gamma_1 + 2\gamma_2) \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \quad (30)$$

Для обоих гамильтонианов можно получить алгебраические уравнения на уровни энергии. Эти уравнения решаются численно.

В Отсутствие рассеяния для крамерсовского дублета

Нетрудно проверить, что для частицы со спином $\frac{1}{2}$

$$\langle \chi | T \psi \rangle = -\langle \psi | T \chi \rangle \quad (31)$$

Тогда $\langle \psi | \hat{A} | T \psi \rangle = 0$ для любого $|\psi\rangle$, если \hat{A} удовлетворяет условию $-T \hat{A}^\dagger T = \hat{A}$. Действительно,

$$\langle \psi | \hat{A} | T \psi \rangle = \langle \hat{A}^\dagger \psi | T \psi \rangle = -\langle \psi | T \hat{A}^\dagger | \psi \rangle = -\langle \psi | (-T \hat{A}^\dagger T) | T \psi \rangle \quad (32)$$

Оператор эволюции T -инвариантной системы удовлетворяет именно такому условию:

$$-T \hat{U} T = U^{-1} = U^\dagger \quad (33)$$

Поэтому рассеяние $|\psi\rangle$ и $|T\psi\rangle$ друг в друга запрещено.

С Вычисления для точечной примеси

С.1 Энергия связанного состояния

Уравнения (19) принимают вид

$$G(\omega, 0, 0)_{11} = \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \frac{\omega + \xi + \frac{1}{m}(2 - \cos p_x - \cos p_y)}{\omega^2 - E_p^2} = \frac{1}{\Delta E}, \quad (34)$$

$$G(\omega, 0, 0)_{22} = \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \frac{-\omega + \xi + \frac{1}{m}(2 - \cos p_x - \cos p_y)}{\omega^2 - E_p^2} = -\frac{1}{\Delta E}, \quad (35)$$

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 выражение (22). Используя его, мы получили (24).

Покажем, что для большого ΔE и $\xi > 0$ связанного состояния в щели нет. В этом случае $\delta\omega < 0$ и логарифм в формуле (22) — большое положительное число. При этом в правой части (34) стоит $\frac{1}{\Delta E} \rightarrow 0$. Это значит, что равенство не может быть выполнено.

С.2 Волновая функция связанного состояния

Волновые функции даются компонентами свободной функции Грина (20). Их можно вычислить с помощью формального трюка. Определим новую функцию $F(x, y)$:

$$F(x, y) \equiv \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \frac{e^{ip_x x + ip_y y}}{\omega^2 - E_p^2} \quad (36)$$

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

$$\begin{aligned} G_{11} &= (\omega + \xi)F(x, y) - \frac{1}{m}(F(x+1, y) + F(x-1, y) + F(x, y+1) + F(x, y-1) - 4F(x, y)) \\ G_{21} &= -it(F(x+1, y) - F(x-1, y)) + t(F(x, y+1) - F(x, y-1)) \end{aligned} \quad (37)$$

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.

$$F(x, y) \approx - \int \frac{p dp d\cos\theta}{(2\pi)^2} \frac{e^{ipr\cos\theta}}{\xi^2 - \omega^2 - (4t^2 + \frac{\xi}{m})p^2} = -\frac{1}{2\pi} \frac{1}{4t^2 + \frac{\xi}{m}} K_0 \left(\sqrt{\frac{\xi^2 - \omega^2}{4t^2 + \frac{\xi}{m}}} R \right) \quad (38)$$

Разности (37) можно аппроксимировать производными. Пользуясь тем, что $K_0(x)$ — решение модифицированного уравнения Бесселя, получим

$$\begin{aligned} G_{11} &= -\frac{1}{2\pi} \frac{1}{4t^2 + \frac{\xi}{m}} \left(\omega + \xi - \frac{1}{m} \frac{\xi^2 - \omega^2}{4t^2 + \frac{\xi}{m}} \right) K_0 \left(\sqrt{\frac{\xi^2 - \omega^2}{4t^2 + \frac{\xi}{m}}} R \right) \\ G_{21} &= \frac{it}{\pi} \sqrt{\frac{\xi^2 - \omega^2}{(4t^2 + \frac{\xi}{m})^3}} K'_0 \left(\sqrt{\frac{\xi^2 - \omega^2}{4t^2 + \frac{\xi}{m}}} R \right) e^{i\theta} \end{aligned} \quad (39)$$

D Задача рассеяния

Задача рассеяния ставится таким образом: к системе, описываемой гамильтонианом H_S , присоединяются трансляционно-инвариантные контакты. Любой набор контактов можно описать, задав элементарную ячейку с гамильтонианом H_L и матрицу перехода между ячейками V_L . Кроме того, нужно задать матрицу перехода между системой и контактами. Полный гамильтониан системы с контактами принимает вид

$$H = \begin{pmatrix} H_S & V_{LS} & 0 & \cdots \\ V_{LS}^\dagger & H_L & V_L & 0 \\ 0 & V_L^\dagger & H_L & V_L \\ \cdots & 0 & V_L^\dagger & \cdots \end{pmatrix} \quad (40)$$

Задачу рассеяния для такого гамильтониана можно свести к неоднородной системе линейных уравнений, которая может быть эффективно решена численно. Такой подход оказывается гораздо выгоднее, чем диагонализация гамильтониана H_S .

Покажем, как свести задачу рассеяния к системе линейных уравнений. Волновая функция в задаче рассеяния имеет вид

$$\Psi = (\Psi_S, \Psi_V(0), \Psi_V(1), \dots) \quad (41)$$

Так как контакты трансляционно инвариантны, $\Psi_V(k)$ можно искать в виде суперпозиции плоских волн: $\Psi_V(k) = \Psi_V e^{ipk}$. Квазиимпульсы и волновые функции определяются уравнениями

$$\begin{aligned} (V_L^\dagger e^{-ip} + H_L + V_L e^{ip} - E) \Psi_V &= 0 \\ \det(V_L^\dagger e^{-ip} + H_L + V_L e^{ip} - E) &= 0 \end{aligned} \quad (42)$$

Если размер матрицы H_L — l , то у уравнений (42) будет $2l$ решений, из которых l соответствуют падающим либо растущим волнам, а l — исходящим либо затухающим.

Пусть волновая функция рассеяния в контактах имеет вид

$$\Psi_L(k) = \Psi_m e^{-ip_m k} + \sum_n r_{mn} \Psi_n e^{ip_n k} \quad (43)$$

Здесь m соответствует падающей моде, а n — затухающим либо исходящим волнам. Волновая функция Ψ_S в регионе рассеяния, разумеется, тоже неизвестна. Подставляя волновую функцию в уравнение Шрёдингера, получим уравнения на Ψ_S и r_{mn} .

$$\begin{aligned} H_S \Psi_S + \sum_n r_{mn} V_{LS} \Psi_n &= -V_{LS} \Psi_m \\ V_{LS}^\dagger \Psi_S - \sum_n r_{mn} V_L \Psi_n e^{-ip_n} &= V_L e^{ip_m} \Psi_m \end{aligned} \quad (44)$$

Легко убедиться, что здесь уравнений столько же, сколько неизвестных, и систему можно решить.

Описанный метод решения задачи рассеяния используется в пакете Kwant [6].

Список литературы

- [1] Mahito Kohmoto. Topological invariant and the quantization of the hall conductance. *Annals of Physics*, 160(2):343–354, Apr 1985.
- [2] 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.
- [3] M. Z. Hasan and C. L. Kane. Topological insulators. *Rev.Mod.Phys.*, 82:3045,2010, February 2010.
- [4] 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.
- [5] 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.
- [6] C. W. Groth, M. Wimmer, A. R. Akhmerov, and X. Waintal. Kwant: a software package for quantum transport. *New Journal of Physics*, 16(6):063065, June 2014.
- [7] C. L. Kane and E. J. Mele. Quantum spin hall effect in graphene. *Physical Review Letters*, 95(22), Nov 2005.
- [8] Evan O. Kane. Band structure of indium antimonide. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 1(4):249–261, Jan 1957.
- [9] 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.
- [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.
- [11] Jian Li, Rui-Lin Chu, J. K. Jain, and Shun-Qing Shen. Topological anderson insulator. *Physical Review Letters*, 102(13), Apr 2009.