

МОСКОВСКИЙ ФИЗИКО–ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ  
КАФЕДРА ПРОБЛЕМ ФИЗИКИ И АСТРОФИЗИКИ

ОТЧЁТ О НАУЧНОЙ РАБОТЕ ЗА 2 СЕМЕСТР 2016–2017 УЧЕБНОГО ГОДА

## Стабильность краевых состояний в топологических изоляторах

*Аникин Евгений*

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

19 июня 2017 г.

Содержание

<b>1</b>	<b>Введение</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Топологический изолятор на основе квантовой ямы HgTe</b>	<b>2</b>
2.1	Эффективный гамильтониан . . . . .	2
2.2	Модель сильной связи для топологического изолятора . . . . .	2
2.3	Краевые состояния . . . . .	3
<b>3</b>	<b>Точечная примесь</b>	<b>4</b>
<b>4</b>	<b>Численная диагонализация решёточного гамильтониана</b>	<b>5</b>
<b>5</b>	<b>Квантовая яма CdTe–HgTe–CdTe в модели сильной связи</b>	<b>6</b>
5.1	Модель однородного полупроводника . . . . .	6
5.2	Модель квантовой ямы . . . . .	7
<b>6</b>	<b>Реконструкция края</b>	<b>8</b>
<b>7</b>	<b>Заключение</b>	<b>8</b>
<b>A</b>	<b>Уровни размерного квантования в квантовой яме HgTe</b>	<b>10</b>
<b>B</b>	<b>Отсутствие рассеяния для крамерсовского дублета</b>	<b>10</b>
<b>C</b>	<b>Вычисления для точечной примеси</b>	<b>10</b>
C.1	Энергия связанного состояния . . . . .	10
C.2	Волновая функция связанного состояния . . . . .	10
<b>D</b>	<b>Коэффициенты Клебша–Гордана</b>	<b>11</b>
<b>E</b>	<b>Задача рассеяния</b>	<b>11</b>

# 1 Введение

Двумерные топологические изоляторы — это двумерные кристаллы с особым 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]

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

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. [2].

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 возмущения, то есть граница топологического изолятора представляет из себя идеальный одномерный проводник.

В многочисленных экспериментах (например, [3], [4]) 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 [4]. Поэтому представляют интерес механизмы, которые могут приводить к рассеянию краевых мод друг в друга.

Целью настоящей работы является изучение нескольких механизмов, которые потенциально могут приводить к рассеянию краевых состояний. Мы рассмотрели точечную примесь в топологическом изоляторе, нашли для неё связанные состояния и обсудили возможность образования примесных уровней в запрещённой зоне. (Похожие вещи обсуждались в [5]. Также методом прямой диагонализации показана устойчивость краевых состояний к сильным потенциальным примесям и, наоборот, локализация магнитным беспорядком. Наконец, обсуждается возможность спонтанного нарушения симметрии около края, вследствие чего краевые состояния перестают быть защищёнными. Все вычисления проделаны в эффективной модели сильной связи, описывающей два уровня размерного квантования квантовой ямы HgTe.

## 2 Топологический изолятор на основе квантовой ямы HgTe

### 2.1 Эффективный гамильтониан

Хотя впервые предложенный топологический изолятор — графен [6], 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 p-зоны. Образуются зоны лёгких и тяжёлых дырок, которые вместе преобразуются как спин 3/2, и отщеплённая зона со спином 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. Поэтому CdTe — полупроводник. 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 [7]. Это было впервые сделано в [8], наши вычисления 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.

Эффективный гамильтониан (с учётом спинов) принимает вид

$$H = \begin{pmatrix} \xi + \frac{p^2}{2m_1} & v(p_x - ip_y) & 0 & 0 \\ v(p_x + ip_y) & -\xi - \frac{p^2}{2m_2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \xi + \frac{p^2}{2m_1} & v(p_x + ip_y) \\ 0 & 0 & v(p_x - ip_y) & -\xi - \frac{p^2}{2m_2} \end{pmatrix} \quad (3)$$

### 2.2 Модель сильной связи для топологического изолятора

Можно написать эквивалентный гамильтониан сильной связи. Блок для одной компоненты спина будет иметь следующий вид (для простоты предполагается симметрия зон):

$$H = \begin{pmatrix} \xi + \frac{1}{m}(2 - \cos p_x - \cos p_y) & 2t(\sin p_x - i \sin p_y) \\ 2t(\sin p_x + i \sin p_y) & -\xi - \frac{1}{m}(2 - \cos p_x - \cos p_y) \end{pmatrix} \quad (4)$$

Спектр этого гамильтониана несложно вычислить:

$$E_p^2 = \left( \xi + \frac{1}{m}(2 - \cos p_x - \cos p_y) \right)^2 + 4t^2(\sin^2 p_x + \sin^2 p_y) \quad (5)$$

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.

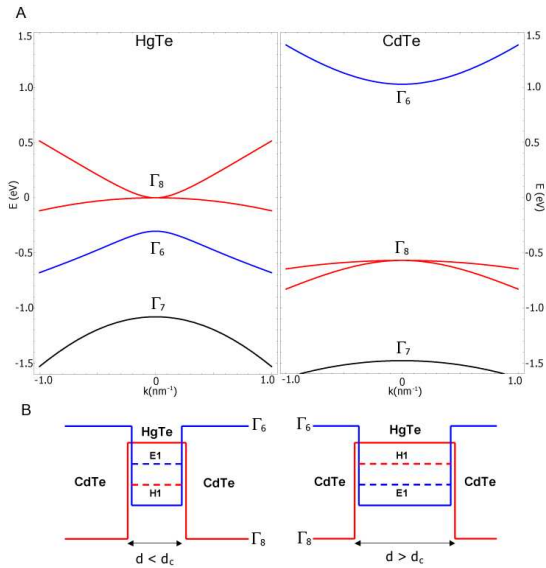


Рис. 1: Объемный спектр HgTe и CdTe и схематическое изображение квантовой ямы

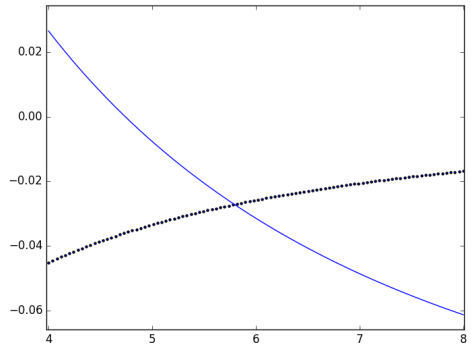


Рис. 2: Уровни размерного квантования

В координатном (решёточном) представлении гамильтониан выглядит так:

$$H_{\text{lattice}} = \sum_{mn} \left\{ a_{mn}^{\dagger} \left( \left( \xi + \frac{2}{m} \right) a_{mn} - \frac{1}{2m} (a_{m+1,n} + a_{m-1,n} + a_{m,n+1} + a_{m,n-1}) \right) \right. \\ \left. - ita_{mn}^{\dagger} (b_{m+1,n} - b_{m-1,n} - i(b_{m,n+1} - b_{m,n-1})) \right. \\ \left. - itb_{mn}^{\dagger} (a_{m+1,n} - a_{m-1,n} + i(a_{m,n+1} - a_{m,n-1})) \right. \\ \left. - b_{mn}^{\dagger} \left( \left( \xi + \frac{2}{m} \right) b_{mn} - \frac{1}{2m} (b_{m+1,n} + b_{m-1,n} + b_{m,n+1} + b_{m,n-1}) \right) \right\} \quad (6)$$

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.

### 2.3 Краевые состояния

Несмотря на то, что у топологического изолятора есть щель в объёмном спектре, на его границе возникают киральные краевые состояния, 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.

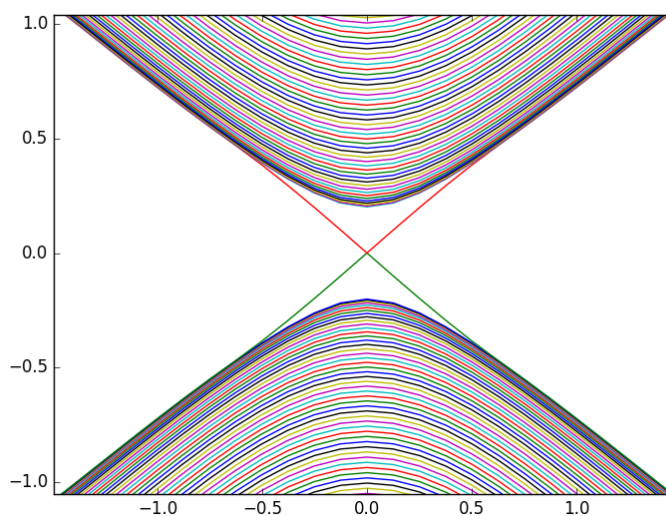


Рис. 3: Спектр полосы топологического изолятора: результат численной диагонализации полосы конечной ширины. Две ветви соответствуют состояниям на разных краях топологического изолятора. Перекрывание этих состояний экспоненциально мало.

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 —  $\frac{v}{\xi}$ .

### 3 Точечная примесь

Мы рассмотрели примесь, описываемую в подходе сильной связи гамильтонианом

$$V = \Delta E(a_{00}^\dagger a_{00} + b_{00}^\dagger b_{00}) \quad (7)$$

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

Связанные состояния даются уравнением

$$\det \left( \mathbb{1} - \Delta E \hat{G}(\omega, 0, 0) \right) = 1, \quad (8)$$

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

$$\hat{G}(\omega, m, n) = \int \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} e^{ip_x m + ip_y n} \frac{\omega + \hat{H}}{\omega^2 - E_p^2}, \quad (9)$$

$\hat{H}$  — матрица (4). 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:

$$\Psi_{\alpha, i}(x) = G_0(\omega, x)_{\alpha i} \quad (10)$$

Здесь  $\alpha$  — «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 C.1)

$$G(\omega, 0, 0)_{11} \approx -\frac{1}{8\pi} \frac{1}{m(4t^2 + \frac{\xi}{m})} \left[ p_{\max}^2 + \left( 2m(\omega + \xi) - \frac{\xi^2 - \omega^2}{4t^2 + \frac{\xi}{m}} \right) \log \left( 1 + \frac{(4t^2 + \frac{\xi}{m}) p_{\max}^2}{\xi^2 - \omega^2} \right) \right] \\ p_{\max} \sim 1 \quad \text{— обрезание на векторе обратной решётки} \quad (11)$$

Для  $R = \sqrt{m^2 + n^2} \gg 1$

$$G_{11}(\omega, m, n) = -\frac{1}{2\pi} \frac{1}{4t^2 + \frac{\xi}{m}} \left( \omega + \xi - \frac{1}{m} \frac{\xi^2 - \omega^2}{4t^2 + \frac{\xi}{m}} \right) K_0 \left( \sqrt{\frac{\xi^2 - \omega^2}{4t^2 + \frac{\xi}{m}}} R \right) \\ G_{21}(\omega, m, n) = -\frac{it}{\pi} \sqrt{\frac{\xi^2 - \omega^2}{(4t^2 + \frac{\xi}{m})^3}} K_1 \left( \sqrt{\frac{\xi^2 - \omega^2}{4t^2 + \frac{\xi}{m}}} R \right) e^{i\theta} \quad (12)$$

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:

$$\delta\omega \approx \frac{(4t^2 + \frac{\xi}{m}) p_{\max}^2}{|\xi|} \exp \left\{ -\frac{p_{\max}^2}{4m|\xi|} - \frac{2\pi}{|\xi| \Delta E (4t^2 + \frac{\xi}{m})} \right\} \quad (13)$$

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 (13)



Рис. 4: 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,  $\Delta E^{-1}$ . «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.

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

## 4 Численная диагонализация решёточного гамильтониана

Как уже говорилось, краевые состояния не рассеиваются на потенциальном беспорядке, если нет объёмных или примесных состояний с той же энергией. Это можно увидеть непосредственно, диагонализуя решёточный гамильтониан. Из результатов численной диагонализации видно, что краевые состояния огибают глубокое препятствие (см. рис. 5).



Рис. 5: Квадрат амплитуды волновой функции краевого состояния, огибающего препятствия. Размер решётки —  $20 \times 20$ , по горизонтальной оси наложены периодические граничные условия.

Также краевые состояния «выживают» под действием даже довольно сильного потенциального беспорядка

$$\hat{V} = \sum_{m,n} V_{mn} (a_{mn}^\dagger a_{mn} + b_{mn}^\dagger b_{mn}), \quad (14)$$

где  $V_{mn}$  равномерно распределены по отрезку  $[-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}]$ , см. рис. 4.



Рис. 6: Волновая функция краевого состояния с беспорядком. Параметры модели:  $\xi, m, t = -0.2, 1, 0.4$ , сила беспорядка —  $0.5$ .

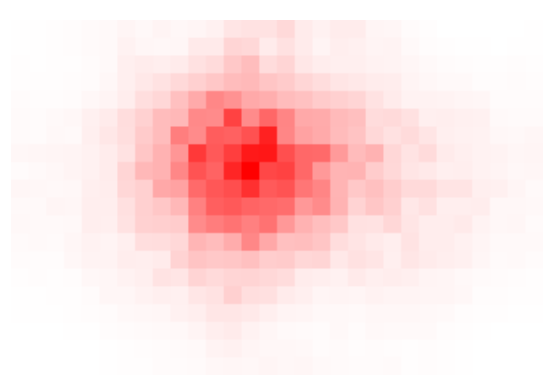


Рис. 7: Волновая функция объёмного состояния с беспорядком для тех же параметров.

Магнитный беспорядок, как нарушающий  $T$ -симметрию, приводит к рассеянию состояний с двумя компонентами спина друг в друга. Это приводит к локализации краевых состояний, что продемонстрировано на рис. 9. Магнитный беспорядок в симуляции имел вид

$$\hat{V}_{\text{mgn}} = \sum_{mn} J \hat{\sigma}_{mn} S_{mn}, \quad (15)$$

$\hat{\sigma}$  — оператор спина на узле,  $S_{mn}$  — случайный вектор на единичной сфере.

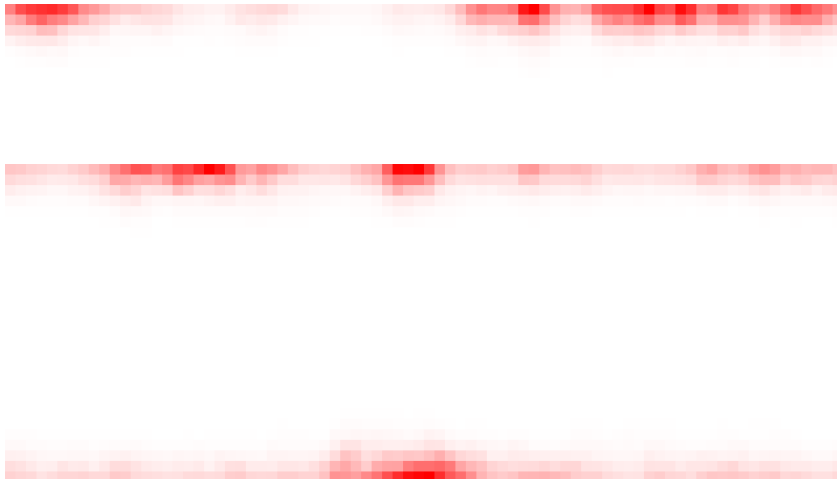


Рис. 8: Волновые функции краевых состояний с магнитным беспорядком для тех же параметров.

Также мы диагонализировали гамильтониан для случая, когда энергии примесных состояний лежат в середине щели (см. рис. 4). Для этого нужно специальным образом подобрать силу возмущения.

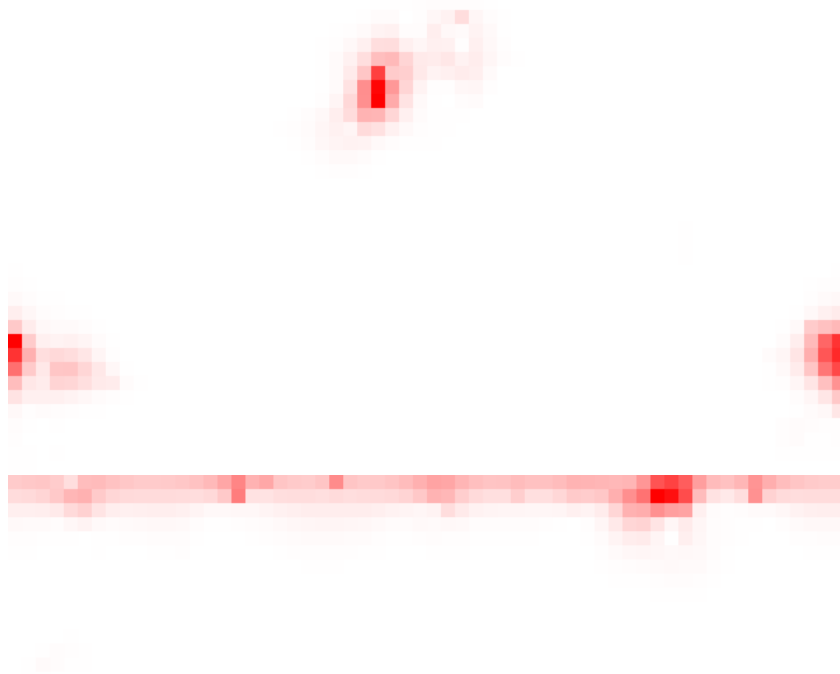


Рис. 9: Волновые функции краевых состояний с примесями внутри щели

## 5 Квантовая яма CdTe–HgTe–CdTe в модели сильной связи

В этом разделе будет построена модель сильной связи, эквивалентная  $k \cdot p$  гамильтониану (22). Численно диагонализуя её, можно независимо получить уровни размерного квантования.

### 5.1 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 (см. приложение D).

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 выражений (34).

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  $6 \times 6$ .

$$H_{\text{full}} = \begin{pmatrix} H_c & T \\ T^\dagger & H_v \end{pmatrix}, \quad (16)$$

Матрицы  $H_c$ ,  $T$ ,  $H_v$  определены формулами (40)–(40), см. стр. 12. Этот гамильтониан можно разложить по малым  $p$ , в результате чего получится гамильтониан Латтинжера:

$$H_v = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \left\{ - \left( \gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma_2 \right) k^2 + 2\gamma_2(k_x^2 J_x^2 + k_y^2 J_y^2 + k_z^2 J_z^2) + 4\gamma_3(k_x k_y J_x J_y + k_x k_z J_x J_z + k_y k_z J_y J_z) \right\} \quad (17)$$

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

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2ma^2} \gamma_1 &= \frac{1}{3} t_{\parallel} \\ \frac{\hbar^2}{2ma^2} \gamma_2 &= \frac{1}{6} (t_{\parallel} - t_{\perp}) \\ \gamma_3 &= 0 \end{aligned} \quad (18)$$

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 [9].

## 5.2 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 (4), переходящие друг в друга при обращении времени.  $\xi$  из гамильтониана (4) — 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 [8], это происходит при толщине ямы, равной 6.4 nm. У меня получилось, что критическая толщина равна  $\approx 7.5$  nm.

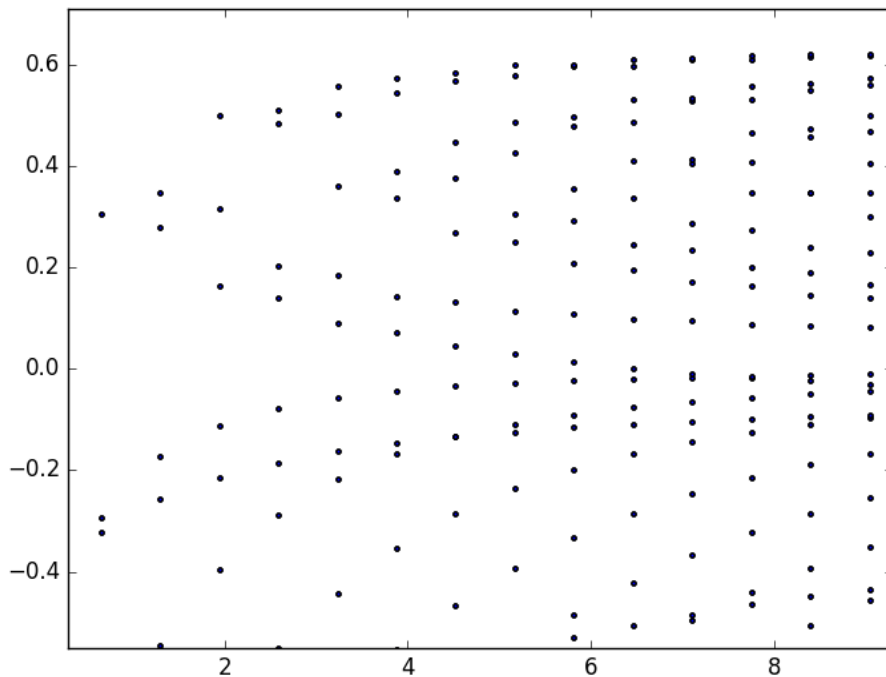


Рис. 10: На графике изображены уровни размерного квантования, полученные численной диагонализацией, для  $k_x, k_y = 0$  в зависимости от толщины слоя HgTe, nm. Видно, что два уровня размерного пересекаются при  $d \approx 7.5$ .



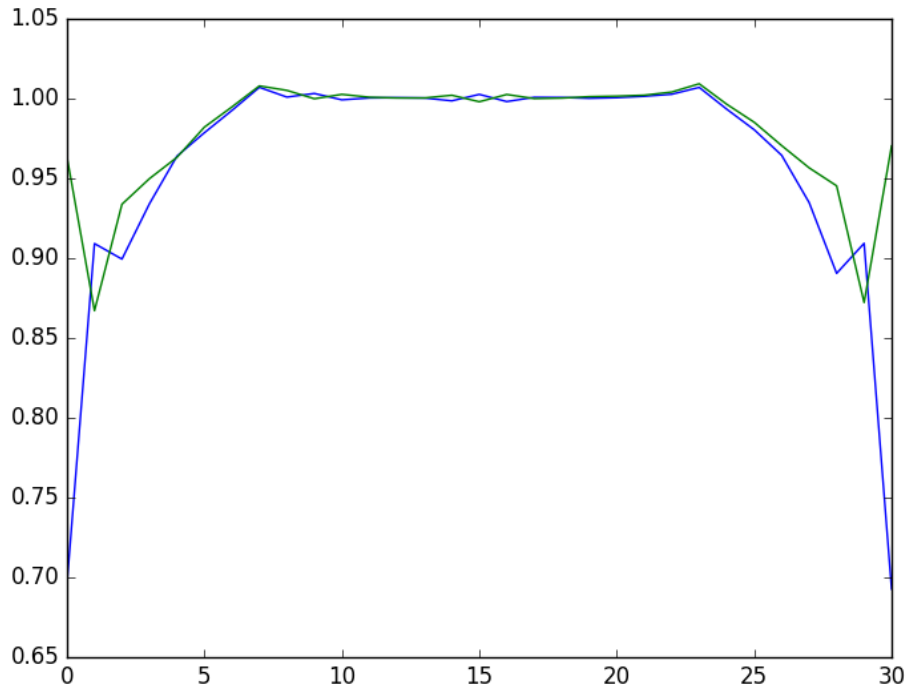


Рис. 11: Плотности электронов со спином вверх и вниз в самосогласованном решении для топологического изолятора с точечным отталкиванием

## 6 Реконструкция края

В данном разделе рассматривается реконструкция края (аналогично [10]) в модели сильной связи (4) из [8].

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:

$$V_{\text{int}} = g \sum_{i,j} \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \quad (19)$$

$$V_{\text{Hartree-Fock}} = g \sum_{i,j} \hat{n}_{i\uparrow} \langle \hat{n}_{i\downarrow} \rangle + \langle \hat{n}_{i\uparrow} \rangle \hat{n}_{i\downarrow} - \langle \hat{n}_{i\uparrow} \rangle \langle \hat{n}_{i\downarrow} \rangle \quad (20)$$

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

Согласно [10], для топологического изолятора с резкой границей реконструкции не происходит. Однако реконструкция возможна, если около края есть плавный отталкивательный потенциал вида

$$\hat{U} = U_0 \sum_{i < L_p, j} \left( 1 - \frac{i}{L} \right) \hat{n}_{ij} \quad (21)$$

Мы провели численную диагонализацию решёточного гамильтониана (4) с потенциалом (21) 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 11, 12, 13. Видно, что уровень Ферми пересекает разное количество краевых мод для спина вверх и спина вниз.

## 7 Заключение

Таким образом, мы рассмотрели два возможных механизма для рассеяния краевых состояний: спонтанное нарушение симметрии и примесные состояния в щели. Реалистичность обоих механизмов вызывает вопросы: нарушение симметрии происходит только для гладкого потенциала около края, а состояния в щели возникают только для довольно глубоких примесей. Тем не менее, требуется аккуратная оценка применимости рассмотренных моделей и их сравнение с экспериментально реализуемыми топологическими изоляторами. Для модели с примесными состояниями в щели также требуется теоретическое и численное исследование транспортных свойств.

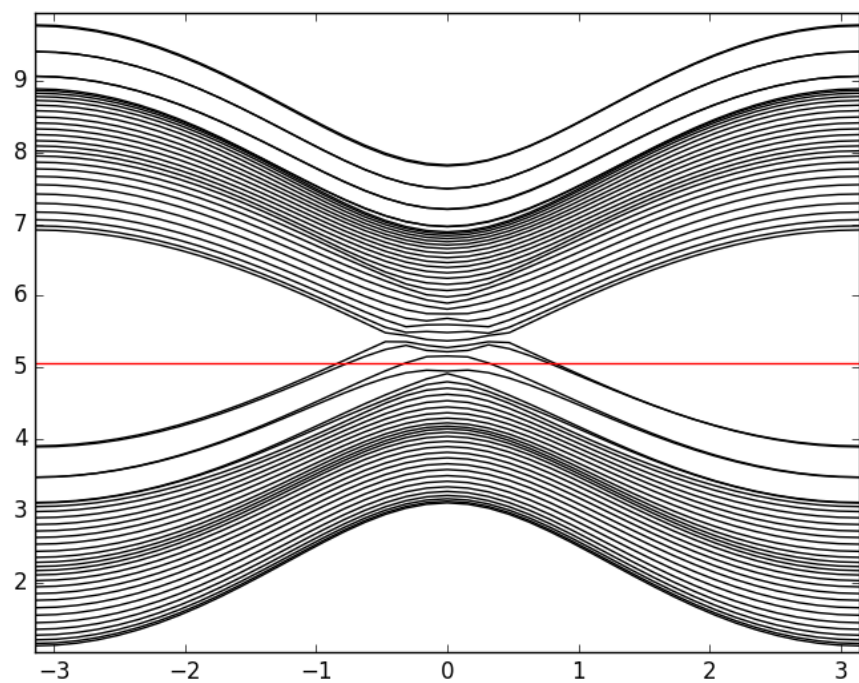


Рис. 12: Спектр электронов со спином вверх в самосогласованном потенциале. Красная линия означает уровень Ферми.

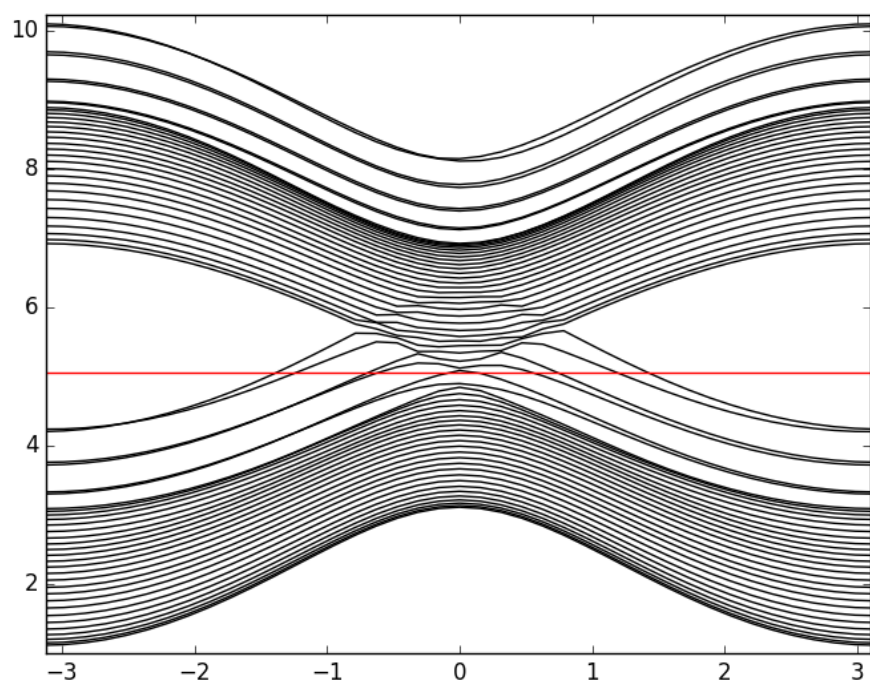


Рис. 13: Спектр электронов со спином вниз в самосогласованном потенциале. Красная линия означает уровень Ферми.

## А Уровни размерного квантования в квантовой яме HgTe

Гамильтониан Кейна имеет вид

$$H = \begin{pmatrix} E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_s} E_{2 \times 2} & T \\ T^\dagger & E_v + H_L \end{pmatrix} \quad (22)$$

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

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

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

$$H_{\text{HH}} = E_v(z) + \frac{1}{2m} \frac{\partial}{\partial z} (\gamma_1(z) - 2\gamma_2(z)) \frac{\partial}{\partial z} \quad (23)$$

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

$$H_{\text{s,LH}} = \begin{pmatrix} E_c - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial z} (1 + 2F) \frac{\partial}{\partial z} & \sqrt{\frac{2}{3}} P k_z \\ \sqrt{\frac{2}{3}} P k_z & E_v + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial z} (\gamma_1 + 2\gamma_2) \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \quad (24)$$

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  $\frac{1}{2}$

$$\langle \chi | T \psi \rangle = -\langle \psi | T \chi \rangle \quad (25)$$

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,

$$\langle \psi | \hat{A} | T \psi \rangle = \langle \hat{A}^\dagger \psi | T \psi \rangle = -\langle \psi | T \hat{A}^\dagger | \psi \rangle = -\langle \psi | (-T \hat{A}^\dagger T) | T \psi \rangle \quad (26)$$

Оператор эволюции  $T$ -инвариантной системы удовлетворяет именно такому условию:

$$-T \hat{U} T = U^{-1} = U^\dagger \quad (27)$$

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

## С Вычисления для точечной примеси

### С.1 Энергия связанного состояния

Уравнения (8) принимают вид

$$G(\omega, 0, 0)_{11} = \int \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} \frac{\omega + \xi + \frac{1}{m}(2 - \cos p_x - \cos p_y)}{\omega^2 - E_p^2} = \frac{1}{\Delta E}, \quad (28)$$

$$G(\omega, 0, 0)_{22} = \int \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} \frac{-\omega + \xi + \frac{1}{m}(2 - \cos p_x - \cos p_y)}{\omega^2 - E_p^2} = -\frac{1}{\Delta E}, \quad (29)$$

Интегралы можно взять приближённо в круге радиуса  $p_{\text{max}}$ , если учесть, что при малых  $p$  спектр близок к коническому. Можно считать, что  $p_{\text{max}} \sim 1$ . После интегрирования получается выражение (11). Используя его, мы получили (13).

Покажем, что для большого  $\Delta E$  и  $\xi > 0$  связанного состояния в щели нет. В этом случае  $\delta\omega < 0$  и логарифм в формуле (11) — большое положительное число. При этом в правой части (28) 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 (9). Их можно вычислить с помощью формального трюка. Определим новую функцию  $F(x, y)$ :

$$F(x, y) \equiv \int \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} \frac{e^{ip_x x + ip_y y}}{\omega^2 - E_p^2} \quad (30)$$

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

$$\begin{aligned} G_{11} &= (\omega + \xi)F(x, y) - \frac{1}{m}(F(x+1, y) + F(x-1, y) + F(x, y+1) + F(x, y-1) - 4F(x, y)) \\ G_{21} &= -it(F(x+1, y) - F(x-1, y)) + t(F(x, y+1) - F(x, y-1)) \end{aligned} \quad (31)$$

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.

$$F(x, y) \approx - \int \frac{p dp d \cos \theta}{(2\pi)^2} \frac{e^{ipr \cos \theta}}{\xi^2 - \omega^2 - (4t^2 + \frac{\xi}{m})p^2} = -\frac{1}{2\pi} \frac{1}{4t^2 + \frac{\xi}{m}} K_0 \left( \sqrt{\frac{\xi^2 - \omega^2}{4t^2 + \frac{\xi}{m}}} R \right) \quad (32)$$

Разности (31) можно аппроксимировать производными. Пользуясь тем, что  $K_0(x)$  — решение модифицированного уравнения Бесселя, получим

$$\begin{aligned} G_{11} &= -\frac{1}{2\pi} \frac{1}{4t^2 + \frac{\xi}{m}} \left( \omega + \xi - \frac{1}{m} \frac{\xi^2 - \omega^2}{4t^2 + \frac{\xi}{m}} \right) K_0 \left( \sqrt{\frac{\xi^2 - \omega^2}{4t^2 + \frac{\xi}{m}}} R \right) \\ G_{21} &= \frac{it}{\pi} \sqrt{\frac{\xi^2 - \omega^2}{(4t^2 + \frac{\xi}{m})^3}} K_0' \left( \sqrt{\frac{\xi^2 - \omega^2}{4t^2 + \frac{\xi}{m}}} R \right) e^{i\theta} \end{aligned} \quad (33)$$

## Д Коэффициенты Клебша–Гордана

Состояния с определённым полным моментом выражаются через  $p_x, p_y, p_z$  орбитали через коэффициенты Клебша–Гордана:

$$\begin{aligned} \Psi_{\frac{3}{2}, \frac{3}{2}} &= \frac{X + iY}{\sqrt{2}} \alpha \\ \Psi_{\frac{3}{2}, \frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{1}{3}} \frac{X + iY}{\sqrt{2}} \beta - \sqrt{\frac{2}{3}} Z \alpha \\ \Psi_{\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}} &= -\sqrt{\frac{1}{3}} \frac{X - iY}{\sqrt{2}} \alpha - \sqrt{\frac{2}{3}} Z \beta \\ \Psi_{\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}} &= -\frac{X - iY}{\sqrt{2}} \beta \end{aligned} \quad (34)$$

$$\begin{aligned} \Psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{X + iY}{\sqrt{2}} \beta + \sqrt{\frac{1}{3}} Z \alpha \\ \Psi_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} &= -\sqrt{\frac{2}{3}} \frac{X - iY}{\sqrt{2}} \alpha - \sqrt{\frac{1}{3}} Z \beta \end{aligned} \quad (35)$$

Здесь  $X, Y, Z$  — атомные орбитали,  $\alpha, \beta$  — состояния со спином вверх и вниз.

## Е 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

$$H = \begin{pmatrix} H_S & V_{LS} & 0 & \ddots \\ V_{LS}^\dagger & H_L & V_L & 0 \\ 0 & V_L^\dagger & H_L & V_L \\ \ddots & 0 & V_L^\dagger & \ddots \end{pmatrix} \quad (36)$$

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

$$\Psi = (\Psi_S, \Psi_V(0), \Psi_V(1), \dots) \quad (37)$$

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

$$\begin{aligned} (V_L^\dagger e^{-ip} + H_L + V_L e^{ip} - E) \Psi_V &= 0 \\ \det(V_L^\dagger e^{-ip} + H_L + V_L e^{ip} - E) &= 0 \end{aligned} \quad (38)$$

Если размер матрицы  $H_L = l$ , то у уравнений (38) будет  $2l$  решений, из которых  $l$  соответствуют падающим либо растущим волнам, а  $l$  — исходящим либо затухающим.

Пусть волновая функция рассеяния в контактах имеет вид

$$\Psi_L(k) = \Psi_m e^{-ip_m k} + \sum_n r_{mn} \Psi_n e^{ip_n k} \quad (39)$$

$$H_c = (E_s + \frac{1}{m_s}(3 - \cos p_x - \cos p_y - \cos p_z))I_{2 \times 2} \quad (40)$$

$$T = P \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}}(\sin p_x + i \sin p_y) & \sqrt{\frac{2}{3}} \sin p_z & \frac{1}{\sqrt{6}}(\sin p_x - i \sin p_y) & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}}(\sin p_x + i \sin p_y) & \sqrt{\frac{2}{3}} \sin p_z & \frac{1}{\sqrt{2}}(\sin p_x - i \sin p_y) \end{pmatrix}, \quad (40)$$

$$H_v = \begin{pmatrix} (t_{\parallel} + t_{\perp})(\cos p_x + \cos p_y) + 2t_{\perp} \cos p_z & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}(t_{\parallel} - t_{\perp})(\cos p_x - \cos p_y) & 0 \\ 0 & \left(\frac{t_{\parallel}}{3} + \frac{5t_{\perp}}{3}\right)(\cos p_x + \cos p_y) + \left(\frac{2t_{\perp}}{3} + \frac{4t_{\parallel}}{3}\right) \cos p_z & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}(t_{\parallel} - t_{\perp})(\cos p_x - \cos p_y) \\ -\frac{1}{\sqrt{3}}(t_{\parallel} - t_{\perp})(\cos p_x - \cos p_y) & 0 & \left(\frac{t_{\parallel}}{3} + \frac{5t_{\perp}}{3}\right)(\cos p_x + \cos p_y) + \left(\frac{2t_{\perp}}{3} + \frac{4t_{\parallel}}{3}\right) \cos p_z & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}(t_{\parallel} - t_{\perp})(\cos p_x - \cos p_y) & 0 & (t_{\parallel} + t_{\perp})(\cos p_x + \cos p_y) + 2t_{\perp} \cos p_z \end{pmatrix} \quad (40)$$

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

$$\begin{aligned} H_S \Psi_S + \sum_n r_{mn} V_{LS} \Psi_n &= -V_{LS} \Psi_m \\ V_{LS}^\dagger \Psi_S - \sum_n r_{mn} V_L \Psi_n e^{-ip_n} &= V_L e^{ip_m} \Psi_m \end{aligned} \tag{40}$$

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

Описанный метод решения задачи рассеяния используется в пакете Kwant [11].

## Список литературы

- [1] Mahito Kohmoto. Topological invariant and the quantization of the hall conductance. *Annals of Physics*, 160(2):343–354, Apr 1985.
- [2] M. Z. Hasan and C. L. Kane. Topological insulators. *Rev.Mod.Phys.*, 82:3045,2010, February 2010.
- [3] 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.
- [4] 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.
- [5] Jie Lu, Wen-Yu Shan, Hai-Zhou Lu, and Shun-Qing Shen. Non-magnetic impurities and in-gap bound states in topological insulators. *New Journal of Physics*, 13(10):103016, Oct 2011.
- [6] C. L. Kane and E. J. Mele. Quantum spin hall effect in graphene. *Physical Review Letters*, 95(22), Nov 2005.
- [7] Evan O. Kane. Band structure of indium antimonide. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 1(4):249–261, Jan 1957.
- [8] 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.
- [9] 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.
- [10] Jianhui Wang, Yigal Meir, and Yuval Gefen. Spontaneous breakdown of topological protection in two dimensions. *Physical Review Letters*, 118(4), Jan 2017.
- [11] 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.