

Краевые моды и связанные состояния в топологических изоляторах

Евгений Аникин
научный руководитель
чл.-к. РАН д. ф-м. н. П.И. Арсеев

ФИАН им. Лебедева

- Отличен от нуля TKNN-инвариант:

$$N = \frac{1}{2\pi i} \int d^2k (\partial_x \langle u | \partial_y u \rangle - \partial_y \langle u | \partial_x u \rangle) \quad (1)$$

- Невозможно задать функцию Блоха во всей зоне Бриллюэна
- Есть киральные краевые состояния

Эффективный гамильтониан для E_1 , N_1 подуровней квантовой ямы HgTe:

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

Описывает топологический изолятор при $\xi < 0$

Защищённость краевых состояний

ветви краевых
состояний образуют
крамерсовский дублет

нет рассеяния

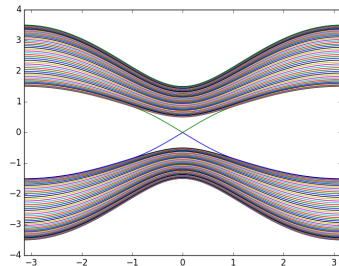


Рис.: Спектр полосы конечной
толщины

Спин–орбитальное взаимодействие в подходе сильной связи

Составляющие модели

- s –орбитали зоны проводимости
- p –орбитали валентной зоны
- Перекрытия ближайших соседей t_{\parallel} , t_{\perp} , m_s , P
- Атомное спин–орбитальное взаимодействие

Спин–орбитальное взаимодействие в подходе сильной связи

Атомные p -орбитали:

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

$$\begin{aligned}\psi_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{2}{3}}\frac{X + iY}{\sqrt{2}}\beta + \sqrt{\frac{1}{3}}Z\alpha \\ \psi_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} &= -\sqrt{\frac{2}{3}}\frac{X - iY}{\sqrt{2}}\alpha - \sqrt{\frac{1}{3}}Z\beta\end{aligned}\quad (4)$$

Спин-орбитальное взаимодействие в подходе сильной связи

Гамильтониан валентной зоны:

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

Спин-орбитальное взаимодействие в подходе сильной связи

Разложение около нуля:

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

где J_i — операторы момента для спина $\frac{3}{2}$, $\gamma_1 = \frac{1}{3} t_{\parallel}$,
 $\gamma_2 = \frac{1}{6} (t_{\parallel} - t_{\perp})$

Спин-орбитальное взаимодействие в подходе сильной связи

Перекрывание с s – зоной:

$$T = P \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}}(\sin p_x + i \sin p_y) & \sqrt{\frac{2}{3}} \sin p_z & \frac{1}{\sqrt{6}}(\sin p_x - i \sin p_y) & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}}(\sin p_x + i \sin p_y) & \sqrt{\frac{2}{3}} \sin p_z & \frac{1}{\sqrt{2}}(\sin p_x - i \sin p_y) \end{pmatrix}, \quad (7)$$

где $P = 2i \langle s(x + e_x) | \hat{H} | p_x(x) \rangle$.

Спин–орбитальное взаимодействие в подходе сильной связи

В результате получается модель Кейна.

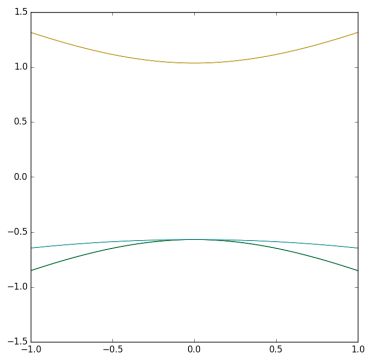


Рис.: Спектр CdTe

Полный гамильтониан расщепляется на два блока 3×3 .

$$H = \begin{pmatrix} E_s + \frac{1}{m^*}(2 - \cos p_x - \cos p_y) & -\frac{P}{\sqrt{2}}(\sin p_x + i \sin p_y) & \frac{P}{\sqrt{6}}(\sin p_x - i \sin p_y) \\ -\frac{P}{\sqrt{2}}(\sin p_x + i \sin p_y) & (t_{\parallel} + t_{\perp})(\cos p_x + \cos p_y) & -\frac{1}{\sqrt{3}}(t_{\parallel} - t_{\perp})(\cos p_x - \cos p_y) \\ \frac{P}{\sqrt{6}}(\sin p_x - i \sin p_y) & -\frac{1}{\sqrt{3}}(t_{\parallel} - t_{\perp})(\cos p_x - \cos p_y) & \left(\frac{t_{\parallel}}{3} + \frac{5t_{\perp}}{3}\right)(\cos p_x + \cos p_y) \end{pmatrix} \quad (8)$$

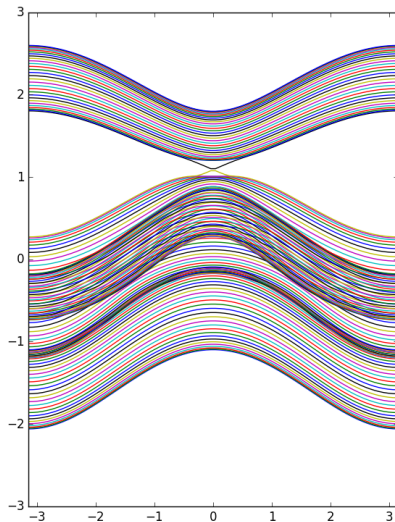
Если $E_s - 2(t_{\parallel} + t_{\perp}) \ll \frac{2}{3}(t_{\parallel} - t_{\perp})$, при малых k “нижнюю” дырочную зону можно не учитывать.

Эффективный гамильтониан для E_1 , H_1 подуровней квантовой ямы HgTe :

$$H = \begin{pmatrix} \xi + \frac{1}{m}(2 - \cos p_x - \cos p_y) & 2t(\sin p_x - i \sin p_y) \\ 2t(\sin p_x + i \sin p_y) & -\xi - \frac{1}{m}(2 - \cos p_x - \cos p_y) \end{pmatrix} \quad (9)$$

Описывает топологический изолятор при $\xi < 0$

Полоска конечной толщины в модели квантовой ямы



Уровни определяются уравнением

$$\det \left[\mathbb{1} - \Delta E \int \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} \frac{\omega + \hat{H}}{\omega^2 - E_p^2} \right] = 1 \quad (10)$$

или

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

Примесные уровни в топологическом изоляторе

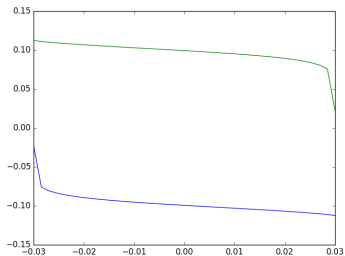


Рис.: $\xi < 0$

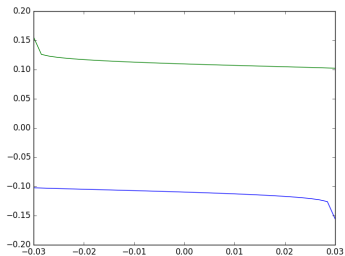


Рис.: $\xi > 0$