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

Двумерные топологические изоляторы

- Отличен от нуля TKNN–инвариант:

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

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

Пример топологического изолятора

Эффективный гамильтониан для E1, H1 подуровней квантовой ямы HgTe:

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

Описывает топологический изолятор при $\xi < 0$

Защищённость краевых состояний

ветви краевых состояний образуют крамерсовский дублет

↓

нет рассеяния

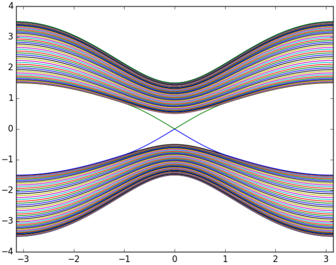


Рис.: Спектр полосы конечной толщины

Спин–орбитальное взаимодействие в подходе сильной связи

Составляющие модели

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

Спин–орбитальное взаимодействие в подходе сильной связи

Атомные p–орбитали:

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

$$\begin{aligned}
\Psi_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{2}{3}}\frac{X+iY}{\sqrt{2}}\beta + \sqrt{\frac{1}{3}}Z\alpha \\
\Psi_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} &= -\sqrt{\frac{2}{3}}\frac{X-iY}{\sqrt{2}}\alpha - \sqrt{\frac{1}{3}}Z\beta
\end{aligned} \tag{4}$$

Спин–орбитальное взаимодействие в подходе сильной связи

Гамильтониан валентной зоны:

$$H_v = \begin{bmatrix} H_l & H_r \end{bmatrix},$$

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

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

Спин–орбитальное взаимодействие в подходе сильной связи

Разложение около нуля:

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

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

Спин–орбитальное взаимодействие в подходе сильной связи

Перекрытие 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.

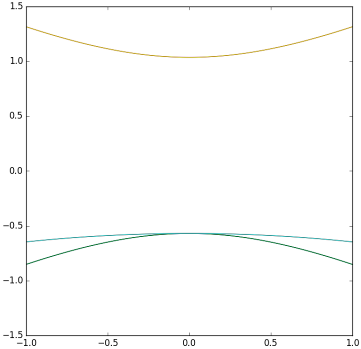


Рис.: Спектр CdTe

Полный гамильтониан расщепляется на два блока 3×3.

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

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

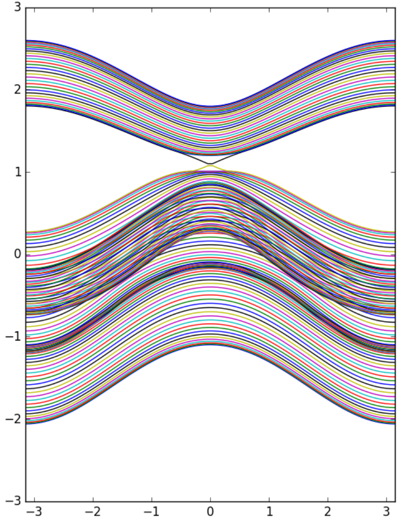
Пример топологического изолятора

Эффективный гамильтониан для E1, H1 подуровней квантовой ямы HgTe:

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

Описывает топологический изолятор при $\xi < 0$

Полоска конечной толщины в модели квантовой ямы



Примесные уровни в топологическом изоляторе

Уровни определяются уравнением

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

или

$$\left[\begin{array}{l} \displaystyle\int \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} \frac{\omega + \xi + \frac{1}{m}(2 - \cos p_x - \cos p_y)}{\omega^2 - E_p^2} = \frac{1}{\Delta E}, \\ \displaystyle\int \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} \frac{-\omega + \xi + \frac{1}{m}(2 - \cos p_x - \cos p_y)}{\omega^2 - E_p^2} = -\frac{1}{\Delta E}, \end{array}\right. \tag{11}$$

Примесные уровни в топологическом изоляторе

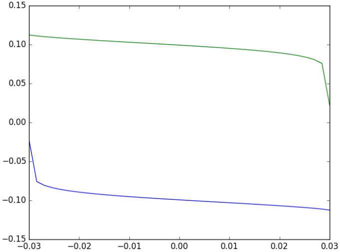


Рис.: $\xi < 0$

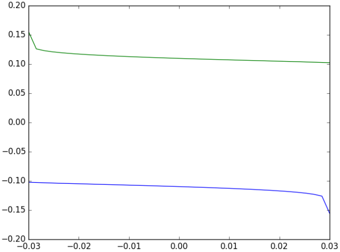


Рис.: $\xi > 0$