Примесь в простейшей модели топологического изолятора

Anikin Evgeny, 128

8 февраля 2017 г.

1 Уровни энергии

Гамильтониан простейшего топологического изолятора может быть записан в виде

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

Уровни энергии —

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

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

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

Связанные состояния даются уравнением

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

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

$$\left[\begin{array}{l} \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \frac{\omega + \xi + \frac{1}{m}(2 - \cos p_x - \cos p_y)}{\omega^2 - E_p^2} = \frac{1}{\Delta E}, \\ \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \frac{-\omega + \xi + \frac{1}{m}(2 - \cos p_x - \cos p_y)}{\omega^2 - E_p^2} = -\frac{1}{\Delta E}, \end{array} \right. \tag{5}$$

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

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

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.

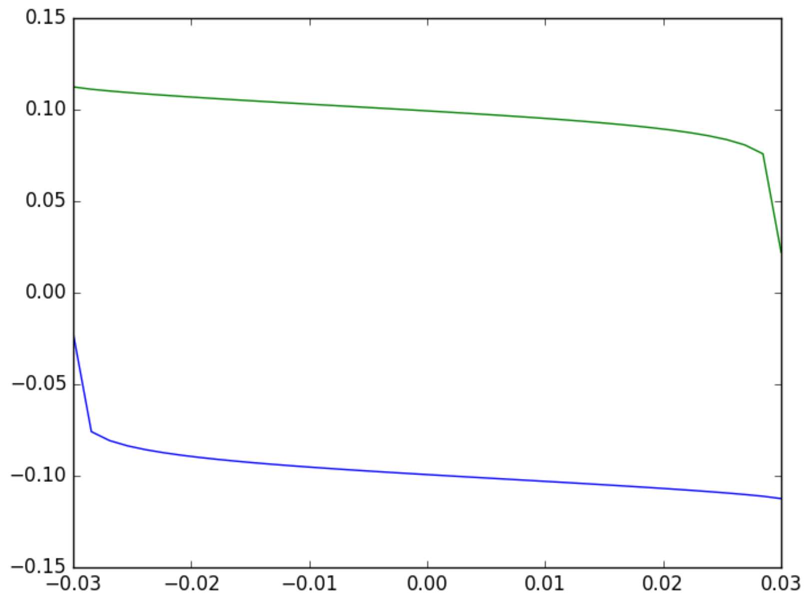

Рис. 1: Компоненты функций Грина

2 Волновые функции

Попробуем вычислить их в том же приближении. Волновые функции даются компонентами свободной функции Грина:

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

Здесь α — “спинорный” индекс, а i — индекс, соответствующий номеру волновой функции.

Функция Грина —

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

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

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

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

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

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.

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

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

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

Найдём момент импульса найденных состояний. Оператор полного момента имеет вид

$$J_z = xp_y - yp_x + \frac{1}{2}\sigma_z \tag{13}$$

Несложно понять, что у двух найденных состояний полный момент равен $\pm\frac{1}{2}$.

Интересно также найти магнитный момент. Оператор магнитного момента —

$$m_z = \frac{e}{2c}(xv_y - yv_x) + \frac{e}{2m_0c}\sigma_z \tag{14}$$

Операторы скорости в низшем порядке по импульсам —

$$\begin{aligned} v_x &= \begin{pmatrix} -\frac{i}{m}\partial_x & 2t \\ 2t & \frac{i}{m}\partial_x \end{pmatrix} \\ v_y &= \begin{pmatrix} -\frac{i}{m}\partial_y & -2it \\ 2it & \frac{i}{m}\partial_y \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{15}$$

Таким образом,

$$m_z = \frac{e}{2mc}\begin{pmatrix} l_z & -2imt \cdot re^{-i\theta} \\ 2imt \cdot re^{i\theta} & l_z \end{pmatrix} + \frac{e}{2m_0c}\sigma_z \tag{16}$$