Примесь в простейшей модели топологического изолятора

Anikin Evgeny, 128

12 декабря 2016 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

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

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

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

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.

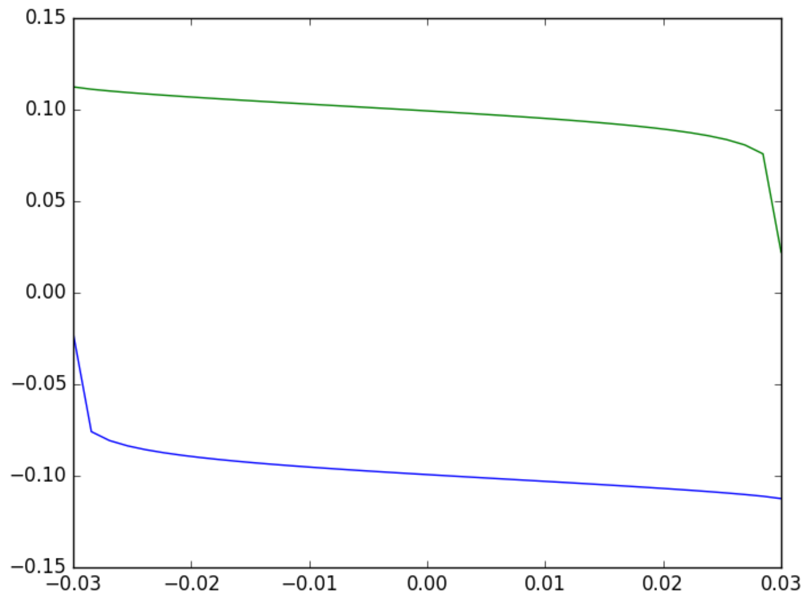

Рис. 1: Компоненты функций Грина

2 Оценка волновых функций

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 —

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

Попробуем вычислить её в том же приближении (в кругу радиуса $p_{\max}$).

Начнём с $G_0(x)_{11}$.

$$\begin{aligned} G_0(x)_{11} &= \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \frac{\omega + \xi + \frac{p^2}{2m}}{\omega^2 - \xi^2 - (4t^2 + \frac{\xi}{m})p^2} e^{ipr\cos\theta} = \\ &= -\frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{2m(4t^2 + \frac{\xi}{m})} \int_0^{p_{\max}} pdp\, d\theta \left(1 + \frac{2m(\omega+\xi) - \frac{\xi^2-\omega^2}{4t^2+\frac{\xi}{m}}}{p^2 + \frac{\xi^2-\omega^2}{4t^2+\frac{\xi}{m}}}\right) e^{ipr\cos\theta} = \\ &= -\frac{1}{2\pi} \frac{1}{2m(4t^2 + \frac{\xi}{m})} \int_0^{p_{\max}} p\, dp\, J_0(pr) \left(1 + \frac{2m(\omega+\xi) - \frac{\xi^2-\omega^2}{4t^2+\frac{\xi}{m}}}{p^2 + \frac{\xi^2-\omega^2}{4t^2+\frac{\xi}{m}}}\right) \end{aligned} \tag{9}$$

Последний интеграл состоит из двух слагаемых. Первое быстро осциллирует, и хочется верить, что это связано с обрезанием. Поэтому мы его выбросим. Второе можно вычислить, устремив $p_{\max}$ к бесконечности. Такой интеграл есть в Градштейне–Рыжике, и в результате получается

$$G_0(x)_{11} = -\frac{1}{2\pi} \frac{2m(\omega+\xi) - \frac{\xi^2-\omega^2}{4t^2+\frac{\xi}{m}}}{2m(4t^2 + \frac{\xi}{m})} K_0\left(\sqrt{\frac{\xi^2-\omega^2}{4t^2+\frac{\xi}{m}}} R\right) \tag{10}$$

Теперь нужно вычислить $G_0(x)_{21}$.

$$G_0(x)_{21} = \frac{1}{(2\pi)^2}\int p\,dp\,d\theta\,\frac{2tpe^{i\theta}e^{ipr\cos\theta}}{\omega^2-\xi^2-(4t^2+\frac{\xi}{m})p^2} =$$

$$= \frac{-t}{2\pi^2(4t^2+\frac{\xi}{m})}\int dp\,d\theta\left(1-\frac{1}{1+\frac{4t^2+\frac{\xi}{m}}{\xi^2-\omega^2}p^2}\right)e^{ipr\cos\theta+i\theta} =$$

$$= \frac{-it}{\pi(4t^2+\frac{\xi}{m})}\int dp\,\left(1-\frac{1}{1+\frac{4t^2+\frac{\xi}{m}}{\xi^2-\omega^2}p^2}\right)J_1(pr) \quad (11)$$

Здесь тоже возникает непонятное слагаемое, в основном пропорциональное r^{-1}. Его мы выбросим. Останется

$$G_0(x)_{21} = \frac{-it}{\pi(4t^2+\frac{\xi}{m})}\sqrt{\frac{\xi^2-\omega^2}{4t^2+\frac{\xi}{m}}}\int_0^\infty e^{-x-r\sqrt{\frac{\xi^2-\omega^2}{4t^2+\frac{\xi}{m}}}\sinh x}\,dx \quad (12)$$