Федеральное агентство по образованию Российской Федерации
Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования
"Московский физико-технический институт (государственный университет)"

Выпускная квалификационная работа на степень бакалавра

Уровни Ландау поверхностных состояний трехмерного топологического изолятора с учетом гексагонального искажения и массы

студент 028 группы Евгений Репин
научный руководитель: д.ф.-м.н. И.С. Бурмистров

Черноголовка 2014

I. ВВЕДЕНИЕ

Изучение топологических изоляторов сегодня на переднем плане теоретической физики конденсированного состояния. Они рассматривались в ряде обзоров[1,2]. Общий интерес к ним вызван как многочисленными возможностями применения в спинтронике (благодаря связи спин-ток краевых состояний), квантовых вычислениях (благодаря их топологической устойчивости) и некоторых других областях, так и нетривиальностью свойств как топологически нетривиальной фазы с точки зрения фундаментальной науки. Одна из важнейших задач при изучении вышеупомянутых краевых состояний - изучение их спектра, что было сделано в ряде экспериментов методами разрешенной по углам фотоэмиссионной спектроскопии[3], оптической спектроскопии[4] в магнитном поле и сканирующей туннельной спектроскопии[5]. С помощью этого метода были экспериментально исследованы уровни Ландау в пленках теллурида сурьмы $\mathrm{Sb_2Te_3}$ разной толщины, проведено детальное изучение плотности поверхностных состояний теллурида висмута $\mathrm{Bi_2Te_3}$ в образце со ступенькой[6] и обнаружено появление нелинейности по k в их спектре с ростом энергии[7]. Теоретически спектр исследовался в работе, в которой находились уровни Ландау в пренебрежении гексагональным искажением[9], а также в работе, в которой модельный гамильтониан для поверхностных состояний выводится из симметрийных соображений, с помощью $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ теории, а также находятся уровни Ландау в том же приближении[8]. Однако, как показывают эксперименты[3,7], в случае теллурида висмута $\mathrm{Bi_2Te_3}$ пренебрежение гексагональным искажением может оказаться неправомерным, то есть уровни Ландау должны находиться с учетом кубического по k члена в гамильтониане, ответственного за этот эффект[10]. Поэтому мы поставили задачу исследовать уровни с учетом этого члена, взяв модельный гамильтониан[10], а также найти плотность поверхностных состояний также с учетом него.

II. ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ В НУЛЕВОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Модельный гамильтониан для поверхностных состояний в $\mathrm{Bi_2Te_3}$ без магнитного поля имеет вид матрицы 2×2:

$$H_0 = \frac{k_x^2+k_y^2}{2m} + v\big(k_x\sigma_y - k_y\sigma_x\big) + \frac{\lambda}{2}\big(k_+^3 + k_-^3\big)\sigma_z, \tag{1}$$

где k_x и k_y - импульсы квазичастицы в плоскости, $k_\pm = k_x \pm i k_y$, v – скорость Ферми, σ_i - матрицы Паули, λ - параметр гексагонального искажения и m –эффективная масса. Спектр для гамильтониана H_0 имеет вид

$$E_\pm(k,\theta) = \frac{k^2}{2m} \pm \sqrt{(kv)^2 + \lambda^2 k^6 \cos^2 3\theta}, \tag{2}$$

где θ – угол между осью k_x и направлением вектора $\boldsymbol{k}$ в плоскости. Экспериментально может реализовываться случай как положительной (например, в случае селенида висмута $\mathrm{Bi_2Se_3}$), так и отрицательной (например, в случае теллурида висмута $\mathrm{Bi_2Te_3}$) эффективной массы[3]. В дальнейшем будет изучаться случай $m<0$. При этом результаты для случая $m>0$ могут быть получены заменой знака энергии E. Плотность состояний имеет вид

$$g(E) = \sum_{\pm}\int_0^{+\infty}\frac{k\,dk}{(2\pi)^2}\int_0^{2\pi} d\theta\,\delta(E - E_\pm(k,\theta)). \tag{3}$$

Удобно ввести энергетические масштабы $E_0 = \sqrt{v^3/\lambda}$ и $\Delta = 2|m|v^2$, и безразмерную энергию $\epsilon = E/\Delta$. Тогда безразмерный параметр $\alpha = (\Delta/E_0)^4$ определяет масштаб гексагонального искажения. В случае его отсутствия, $\alpha = 0$, плотность состояний имеет вид:

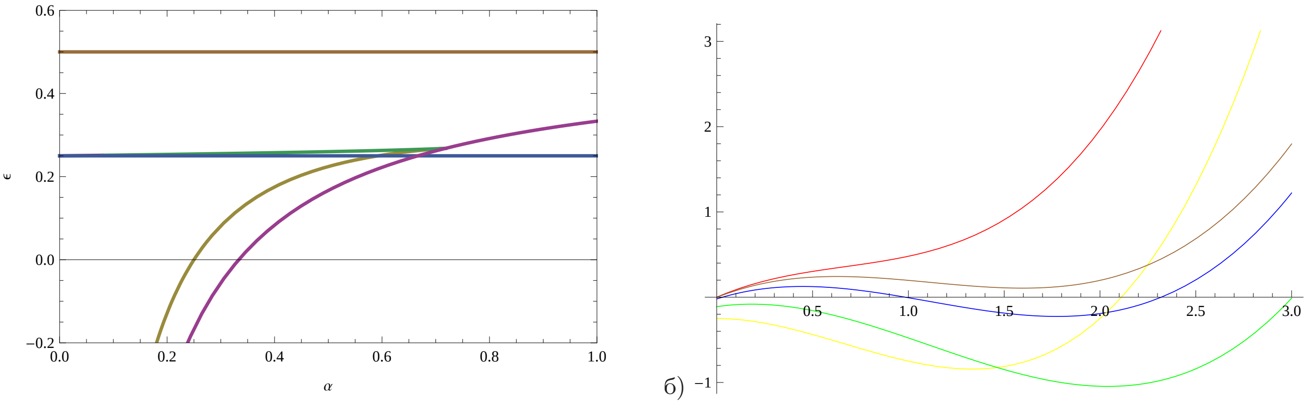
$$g(\epsilon) = \frac{\Delta}{2\pi v^2}\begin{cases} 1, & \epsilon < 0, \\ (1-4\epsilon)^{-1/2}, & 0 \leqslant \epsilon < 1/4, \\ 0, & 1/4 < \epsilon. \end{cases} \tag{4}$$

При ненулевом α плотность состояний будет

$$g(E) = \frac{\Delta}{2\pi v^2} F(\epsilon,\alpha), \tag{5}$$

где функция

$$F(\epsilon,\alpha) = \int_0^\infty \frac{dx}{\pi}|\epsilon + x|\,\mathrm{Re}\,\frac{1}{\sqrt{(\epsilon+x)^2 - x}}\,\mathrm{Re}\,\frac{1}{\sqrt{\alpha x^3 + x - (\epsilon+x)^2}}. \tag{6}$$



а) б)

Рис. 1: а) Диаграмма областей различного поведения плотности состояний. б) Типичное поведение кубического многочлена $\alpha x^3 + x - (\epsilon + x)^2$ в разных областях: A1 – красная кривая, A2 – зеленая кривая, A3 – синия кривая, A4 – коричневая кривая, B – желтая кривая.

Пределы интегрирования по x определяются требованием положительности подкоренных выражений, поэтому мы рассмотрели диаграмму, выделяющую принципиально различные в этом отношении области (см. Рис. 1а). В каждой из областей поведение кубического многочлена $\alpha x^3 + x - (\epsilon + x)^2$ различно (см. Рис. 1б).

Выше $\epsilon = 1/2$ расположена область B, ниже кривой $\epsilon = 1/2 - 1/6\alpha$ – область A1. В оставшейся области выше кривой $\alpha_-(\epsilon) = \frac{2(\epsilon + z_-) - 1}{3z_-^2}$, параметризуемой с помощью $z_\pm = 1 - 2\epsilon \pm \sqrt{(1-2\epsilon)^2 - 3\epsilon^2}$ - координат, в которых производная кубического многочлена обращается в нуль вместе с его значением, находится область A2. Между кривой $\epsilon = 1/2 - 1/6\alpha$ и пересекающей ее ближайшей кривой $\alpha_+(\epsilon) = \frac{2(\epsilon + z_+) - 1}{3z_+^2}$ лежит область A4. Оставшийся линейно-связный кусок – область A3. Вблизи $\alpha = 0.7$ имеется тройная точка - точка пересечения трех границ, определяемая условием $z_+ = z_-$. Координаты этой точки

$$\epsilon_c = \frac{1}{2 + \sqrt{3}} \approx 0.27, \qquad \alpha_c = \frac{3 + 2\sqrt{3}}{9} \approx 0.71. \tag{7}$$

Обозначим через c_1, c_2, c_3 корни кубического многочлена $\alpha x^3 + x - (\epsilon + x)^2$ в порядке возрастания, если существуют все три действительных корня, и c_i, где $i = 1$ или 3, если действительный корень только один. Корни квадратичного многочлена $(\epsilon + x)^2 - x$ равны $x_{1,2} = (1 - 2\epsilon \mp \sqrt{1 - 4\epsilon})/2$. Обозначим также

$$F_1(\epsilon,\alpha) = \int_{c_1}^{x_1} dx\, \mathcal{F}(x,\epsilon,\alpha), \quad F_2(\epsilon,\alpha) = \int_{x_2}^{c_2} dx\, \mathcal{F}(x,\epsilon,\alpha), \quad F_3(\epsilon,\alpha) = \int_{c_3}^{+\infty} dx\, \mathcal{F}(x,\epsilon,\alpha),$$
$$F_4(\epsilon,\alpha) = \int_{c_1}^{c_2} dx\, \mathcal{F}(x,\epsilon,\alpha), \quad F_5(\epsilon,\alpha) = \int_{x_2}^{+\infty} dx\, \mathcal{F}(x,\epsilon,\alpha), \tag{8}$$

где

$$\mathcal{F}(x,\epsilon,\alpha) = \frac{1}{\pi} \frac{|\epsilon + x|}{\sqrt{(\epsilon + x)^2 - x}\sqrt{\alpha x^3 + x - (\epsilon + x)^2}}. \tag{9}$$

В области A3 при условии $\epsilon < 1/4$

$$F(\epsilon,\alpha) = F_1(\epsilon,\alpha) + F_2(\epsilon,\alpha) + F_3(\epsilon,\alpha), \tag{10}$$

а при условии $\epsilon > 1/4$

$$F(\epsilon,\alpha) = F_3(\epsilon,\alpha) + F_4(\epsilon,\alpha). \tag{11}$$

В области A4 при условии $\epsilon < 1/4$

$$F(\epsilon,\alpha) = F_1(\epsilon,\alpha) + F_5(\epsilon,\alpha), \tag{12}$$

а при условии $\epsilon > 1/4$

$$F(\epsilon,\alpha) = F_4(\epsilon,\alpha) + F_3(\epsilon,\alpha). \tag{13}$$

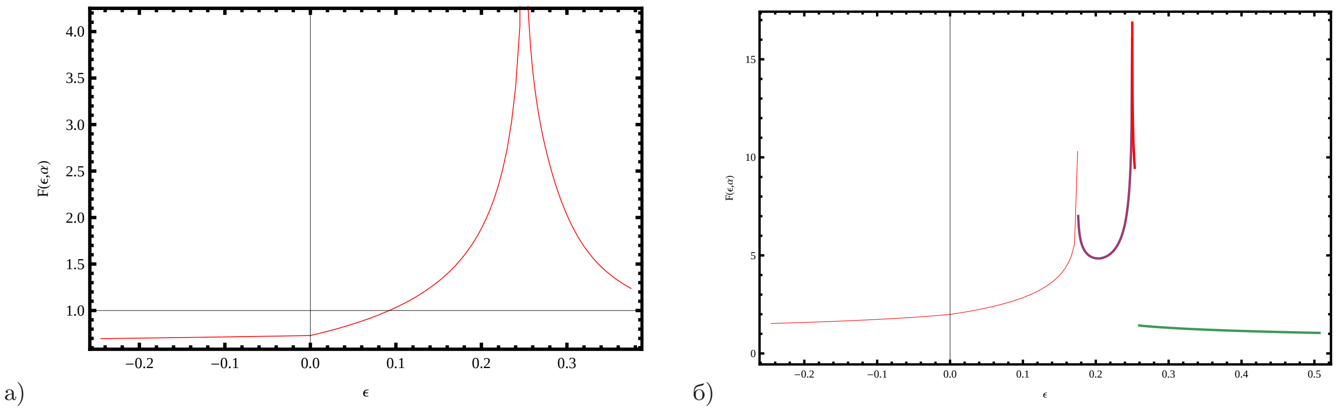


Рис. 2: Плотность состояний как функция энергии: а) $\alpha = 2$, б) $\alpha = 0.4$

В области A2 всегда $\epsilon > 1/4$, и

$$F(\epsilon, \alpha) = F_3(\epsilon, \alpha). \tag{14}$$

В области A1 функция F даётся тем же выражением, что и в области A4, в области B все также как и в A2. В плотности состояний имеется особенность при любых α и $\epsilon = 1/4$, связанная со слиянием корней квадратичного многочлена в знаменателе, главная асимтотика этой особенности имеет вид:

$$F(\epsilon, \alpha) \approx \frac{4}{\pi\sqrt{\alpha}} \ln \frac{1}{|\epsilon - 1/4|}, \qquad \left|\epsilon - \frac{1}{4}\right| \ll 1. \tag{15}$$

По соображениям непрерывности (действительные корни квадратичного многочлена сначала сливаются прежде чем исчезнуть) и согласно проверке в одной точке области A3, если действительные корни есть, то они оба лежат между первым (c_1) и вторым (c_2) по возрастанию корнями кубического многочлена. Таким образом, вторая особенность в плотности состояний появляется на всей границе областей A3 и A4. Главная асимптотика этой особенности

$$F(\epsilon, \alpha) \approx \frac{|\epsilon + z_+|}{\pi[(\epsilon + z_+)^2 - z_+]^{1/2}[1 - 3\alpha_+(1 - 2\epsilon)]^{1/4}} \ln \frac{1}{|\alpha - \alpha_+(\epsilon)|}, \qquad |\alpha - \alpha_+(\epsilon)| \ll 1. \tag{16}$$

При этом z_+ совпадает со вторым по величине корнем кубического многочлена. На границе областей A2 и A3 происходит скачок плотности состояний, связанный с появлением бесконечно малой области интегрирования между точками c_1 и c_2 – первыми двумя корнями кубического многочлена. Его велична имеет вид

$$\Delta_{A2,A3} = \lim_{c_1 \to c_2} \int_{c_1}^{c_2} \frac{dx}{\pi\sqrt{\alpha}} \frac{|\epsilon + x|}{\sqrt{(\epsilon + x)^2 - x}\sqrt{c_3 - x}\sqrt{(x - c_1)(c_2 - x)}} = \frac{|\epsilon + z_-|}{[(\epsilon + z_-)^2 - z_-]^{1/2}[1 - 3\alpha_-(1 - 2\epsilon)]^{1/4}}. \tag{17}$$

в этом случае z_- совпадает с первым по величине корнем кубического многочлена. При изменении α от 0 до малого положительного значения корневая особенность плотности состояний при $\epsilon = 1/4$ расщепляется на логарифмическую и скачок, а вторая особенность появляется со стороны $\epsilon = -\infty$. Для примера, поведение плотности состояний (функции $F(\epsilon, \alpha)$) для двух разных значений параметра α показано на Рис. 2.

Особенности в плотности состояний (особенности ван-Хова) связаны со сложной и неодносвязанной формой Ферми-поверхности для спектра (2). Ее удобно иллюстрировать графически. В зависимости от значений параметра α имеется три принципиально различных случая эволюции Ферми-поверхности с ростом энергии при различных α. В случае $\alpha > \alpha_c \approx 0.71$ имеется одна особенность в плотности состояний. Она связана с касанием лепестков и центральной части при значении $\epsilon = 1/4$ (см. Рис. 3). В случае $\alpha_0 < \alpha < \alpha_c$, где $\alpha_0 = \alpha_+(1/4) = 16/27 \approx 0.59$, есть две логарифмических особенности в плотности состояний. Первая при $\epsilon = 1/4$ связана со слиянием центральной площади и лепестков (см. Рис. 4а) и б)), а вторая при $\epsilon = \epsilon_+$ (ϵ_+ определяется решением уравнения $\alpha = \alpha_+(\epsilon_+)$) связана со слиянием лепестков воедино (см. Рис. 4в) и г)). Скачок плотности состояний связан с исчезновением областей на рисунках Рис. 4 д) и е). При $\alpha < \alpha_0$ также имеется две логарифмичекие особенности в плотности состояний. Первая при $\epsilon = \epsilon_+$ связана со слиянием лепестков воедино (см. Рис. 5а) и б)). Вторая при $\epsilon = 1/4$ связана со слиянием центральной площади и лепестков (см. Рис. 5в) и г)) Скачок плотности состояний связан с исчезновением областей на рисунках Рис. 5 д) и е).

III. УРОВНИ ЛАНДАУ: ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

При наличии перпендикулярного магнитного поля H в гамильтониане (1) необходимо сделать подстановку Пайерлса: $\boldsymbol{k} \to \boldsymbol{k} - e\boldsymbol{A}$, где e - заряд электрона, а $\boldsymbol{A}$ векторный потенциал, соответствующий полю $\boldsymbol{H}$. Также к гамильтониану (1) необходимо добавить член, описывающий зеемановское расщепление, $g_L \mu_B H \sigma_z/2$, где g_L и μ_B обозначают g-фактор и магнетон Бора, соответственно. Таким образом, гамильтониан принимает вид:

$$H_0 = \frac{(k_x - eA_x)^2 + (k_y - eA_y)^2}{2m} + v\big((k_x - eA_x)\sigma_y - (k_y - eA_y)\sigma_x\big) + \frac{\lambda}{2}\big((k_+ - eA_+)^3 + (k_- - eA_-)^3\big)\sigma_z + \frac{1}{2} g_L \mu_B H \sigma_z, \tag{18}$$

где $\nabla \times \boldsymbol{A} = \boldsymbol{H}$ и $A_\pm = A_x \pm iA_y$. Для случая $\lambda = 0$ гамильтониан (1) описывает двумерные электроны с расщеплением типа Рашбы[11]. В этом случае уровни Ландау имеют вид[11]

$$E_n^\sigma = -n\omega_c + \sigma\sqrt{E_0^2 + \frac{2nv^2}{l_H^2}}, \qquad n = 1, 2, \ldots, \qquad \sigma = \pm E_0 = -\frac{\omega_c}{2} - \frac{g_L \mu_B H}{2}. \tag{19}$$

где $l_H = \frac{1}{\sqrt{|m|\omega_c}}$ – магнитная длина, и циклотронная частота $\omega_c = \frac{eH}{|m|}$. В калибровке Ландау $\boldsymbol{A} = (-Hy, 0, 0)$ собственные векторы

$$\psi_+ = \begin{pmatrix}\psi\\ \phi\end{pmatrix} = \frac{e^{ik_x x}}{\sqrt{L_x A_n}}\begin{pmatrix}-iD_n|n-1>\\ |n>\end{pmatrix}, \tag{20}$$

$$\psi_- = \begin{pmatrix}\psi\\ \phi\end{pmatrix} = \frac{e^{ik_x x}}{\sqrt{L_x A_n}}\begin{pmatrix}|n-1>\\ -iD_n|n>\end{pmatrix}, \tag{21}$$

где

$$D_n = \frac{\sqrt{2n}v}{l_H(E_0 + \sqrt{E_0^2 + \frac{2nv^2}{l_H^2}})} \tag{22}$$

и $A_n^2 = 1 + D_n^2$. Для рассмотрения члена с гексагональным искажением в гамильтониане (1)

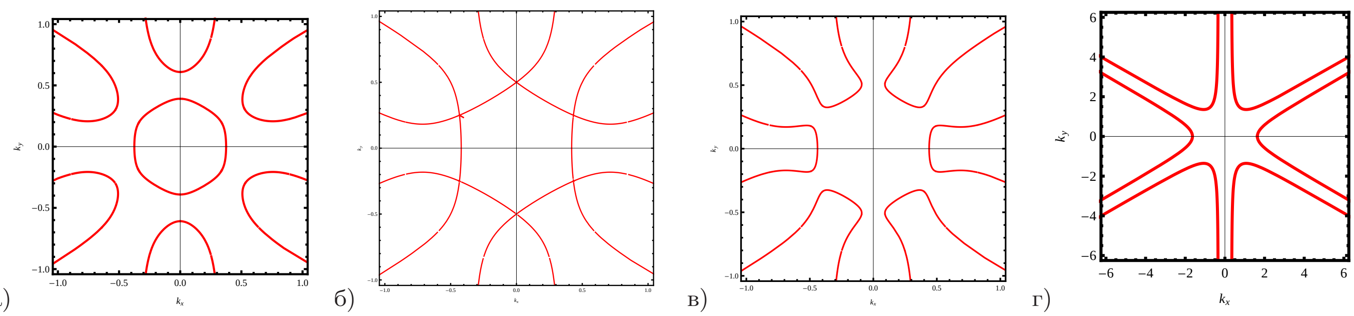
$$V = \frac{\lambda}{2}(k_+^3 + k_-^3)\sigma_z \tag{23}$$

как возмущения, необходимо вычислить его матричные элементы. Они имеют вид (по самосопряженности достаточно указать следующие четыре матричных элемента)

$$V_{n,n+3}^{++} = A(-a_n^+ a_{n+3}^+ \zeta_{n+2} - b_n^+ b_{n+3}^+ \zeta_{n+3}), \tag{24}$$

$$V_{n,n-3}^{--} = A(b_n^- b_{n+3}^- \zeta_n + a_n^- a_{n+3}^- \zeta_{n-1}), \tag{25}$$

$$V_{n,n+3}^{\pm} = A(a_n^+ a_{n+3}^- \zeta_{n+2} + a_{n+3}^+ a_n^- \zeta_{n+3}), \tag{26}$$



а) б) в) г)

Рис. 3: Ферми-поверхность в случае $\alpha = 1$ для а) $\epsilon = 0.238$, б) $\epsilon = 1/4$, в) $\epsilon = 0.2545$ и г) $\epsilon = 2$.

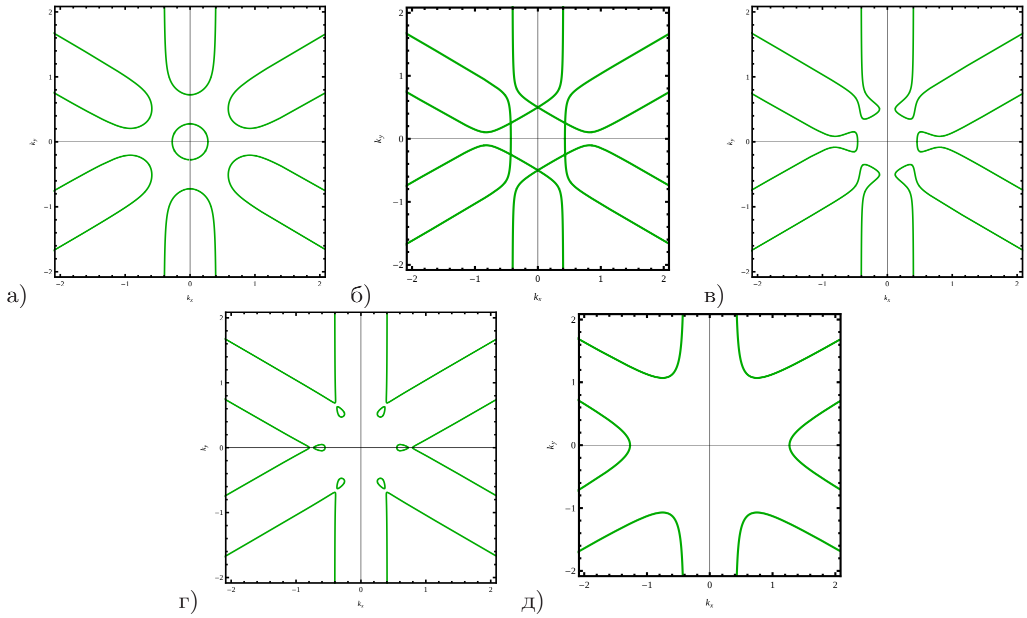


Рис. 4: Ферми-поверхность в случае $\alpha = 0.68$: а) $\epsilon = 0.2$, б) $\epsilon = 1/4$, в) $\epsilon = 0.255$, г) $\epsilon = 0.2645$ и д) $\epsilon = 0.265$

$$V^{\pm}_{n,n-3} = A(b^{-}_{n-3}b^{+}_{n}\zeta_n + b^{-}_{n}b^{+}_{n-3}\zeta_{n-1}), \tag{27}$$

где $a^{+}_{n} = b^{-}_{n} = -i\frac{D_n}{\sqrt{A_n}}$, $a^{-}_{n} = b^{+}_{n} = \frac{1}{\sqrt{A_n}}$, $\zeta_n = \sqrt{n(n-1)(n-2)}$, $A = \frac{\sqrt{2}\lambda}{l_H^3}$. Остальные получаются сопряжением.

Таким образом, поправка второго порядка за счет наличия гексагонального искажения имеет вид

$$E^{\sigma,(2)}_{n} = -\sum_{\sigma'}\left(\frac{|V^{\sigma',\sigma}_{n+3,n}|^2}{E^{\sigma'}_{n+3} - E^{\sigma}_{n}} + \frac{|V^{\sigma',\sigma}_{n-3,n}|^2}{E^{\sigma'}_{n-3} - E^{\sigma}_{n}}\right). \tag{28}$$

Поправка второго порядка растет с ростом n. То есть, мы заключаем, что теория возмущений не работает при

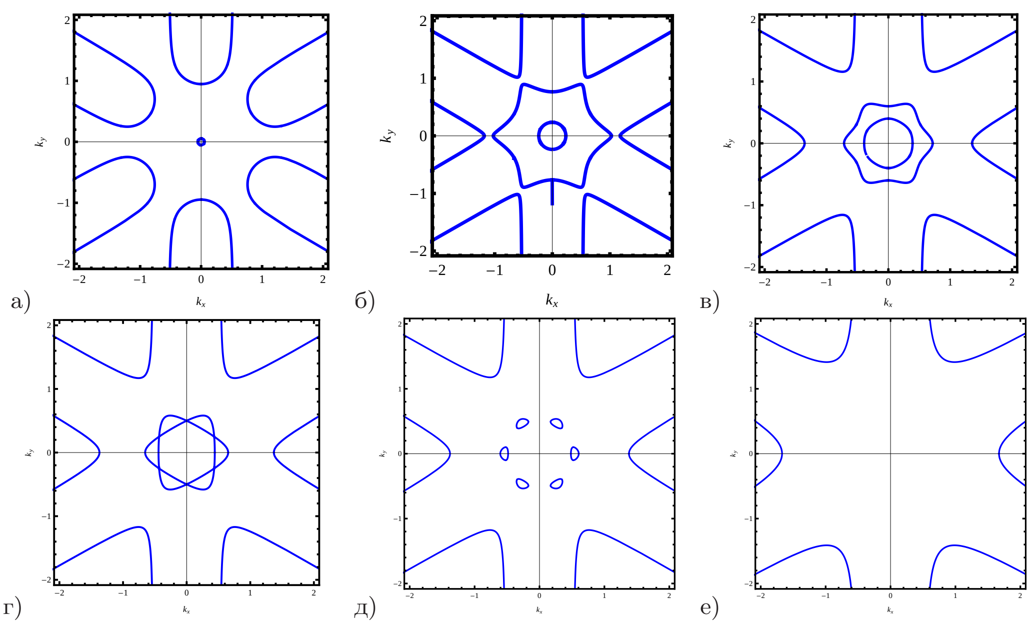


Рис. 5: Ферми-поверхность в случае $\alpha = 0.4$: а) $\epsilon = 0.05$, б) $\epsilon = 0.18$, в) $\epsilon = 0.24$, г) $\epsilon = 1/4$, д) $\epsilon = 0.255$, и е) $\epsilon = 0.6$.

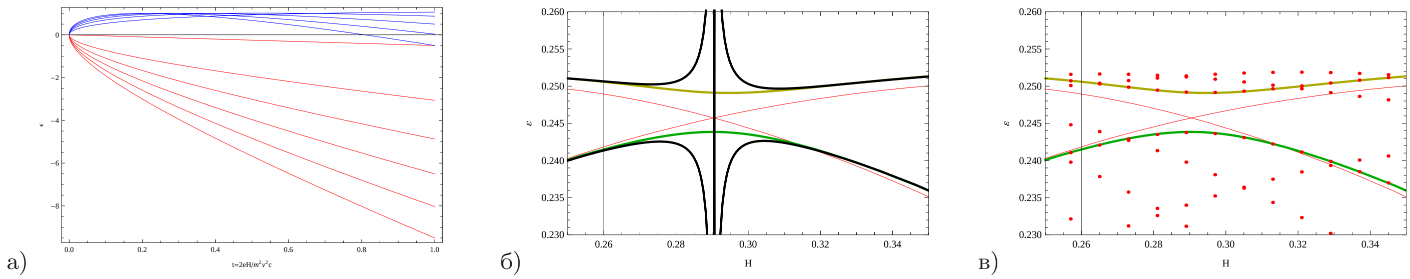


Рис. 6: а) Уровни Ландау без гексагонального искажения. б) Поведение уровней Ландау 4+ и 7+ в окрестности точки их пересечения, черным цветом - обычная теория возмущений, зеленый и бежевый - усовершенствованная теория возмущений. в) Те же уровни, сравнение с результатом численной диагонализации гамильтониана, обрезанного на $n = 100$. Параметр $\alpha = 0.05$.

больших значениях n. Обозначая $\eta = \frac{Al_H}{v}$ и $\mu = 2|m|l_H v$ имеем стандартные условия применимости

$$n \ll 1/\eta, \eta < 1, \mu > 1, \eta > 1/\mu^2, \tag{29}$$

$$n \ll 1/(\eta\mu)^2, \eta < 1, \mu > 1, \eta < 1/\mu^2, \tag{30}$$

$$n \ll 1/\mu^2, \mu < 1, \eta < \mu^2, \tag{31}$$

$$n \ll 1/(\eta\mu)^{3/2}, \mu < 1, \eta > \mu^2, \eta < 1/\mu. \tag{32}$$

При других соотношениях между параметрами η и μ теория возмущений не применима. Помимо роста матричных элементов возмущения с ростом номера имеется другая проблема для теории возмущений – пересечение невозмущенных уровней как функций магнитного поля.

Для улучшения теории возмущений вблизи таких пересечений необходимо строить теорию возмущений, аналогично тому как это делается в случае вырожденных уровней. Нужно совершить унитарное преобразование исходного гамильтониана, чтобы диагонализовать матрицу размера 2×2 пересекающихся уровней вблизи этой точки. Запишем гамильтониан (1) в базисе невозмущенных состояний $\psi_\pm$:

$$H = \begin{pmatrix} A & B \\ B^\dagger & C \end{pmatrix}, \tag{33}$$

где блоки

$$A = \begin{pmatrix} E_n^+ & V_{n,n+3}^{++} \\ V_{n,n+3}^{++} & E_{n+3}^+ \end{pmatrix}, \tag{34}$$

$$B = \begin{pmatrix} V_{n,n+3}^{+-} & V_{n,n-3}^{++} & V_{n,n-3}^{+-} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & V_{n+3,n}^{+-} & V_{n+3,n+6}^{++} & V_{n+3,n+6}^{+-} \end{pmatrix}, \tag{35}$$

и

$$C = \begin{pmatrix} E_{n+3}^- & 0 & 0 & V_{n+3,n}^{--} & V_{n+3,n+6}^{-+} & V_{n+3,n+6}^{--} \\ 0 & E_{n-3}^+ & 0 & V_{n-3,n}^{+-} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_{n-3}^- & V_{n-3,n}^{--} & 0 & 0 \\ V_{n,n+3}^{--} & V_{n,n-3}^{-+} & V_{n,n-3}^{--} & E_n^- & 0 & 0 \\ V_{n+6,n+3}^{+-} & 0 & 0 & 0 & E_{n+6}^+ & 0 \\ V_{n+6,n+3}^{--} & 0 & 0 & 0 & 0 & E_{n+6}^- \end{pmatrix}. \tag{36}$$

Унитарное преобразование, затрагивающее только A и B и диагонализующее блок A, ищем в виде

$$U = \begin{pmatrix} u & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{37}$$

Обозначим

$$\gamma_{\pm} = \frac{(-E^{+}_{n} + E^{+}_{n+3})}{2V^{++}_{n,n+3}} \pm \frac{\sqrt{(\frac{E^{+}_{n}-E^{+}_{n+3}}{2})^2 + V^{+-2}_{n,n+3}}}{V^{++}_{n,n+3}}, \tag{38}$$

тогда искомое u имеет вид:

$$u = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{1+\gamma_+^2}} & \frac{1}{\sqrt{1+\gamma_-^2}} \\ \frac{\gamma_+}{\sqrt{1+\gamma_+^2}} & \frac{\gamma_-}{\sqrt{1+\gamma_-^2}} \end{pmatrix}. \tag{39}$$

Действие преобразования на B дает новые матричные элементы связи между уровнями

$$u^{\dagger}B = \begin{pmatrix} \frac{V^{+-}_{n,n+3}}{\sqrt{1+\gamma_+^2}} & \frac{V^{++}_{n,n-3}}{\sqrt{1+\gamma_+^2}} & \frac{V^{+-}_{n,n-3}}{\sqrt{1+\gamma_+^2}} & \frac{\gamma_+ V^{+-}_{n+3,n}}{\sqrt{1+\gamma_+^2}} & \frac{\gamma_+ V^{++}_{n+3,n+6}}{\sqrt{1+\gamma_+^2}} & \frac{\gamma_+ V^{+-}_{n+3,n+6}}{\sqrt{1+\gamma_+^2}} \\ \frac{V^{+-}_{n,n+3}}{\sqrt{1+\gamma_-^2}} & \frac{V^{++}_{n,n-3}}{\sqrt{1+\gamma_-^2}} & \frac{V^{+-}_{n,n-3}}{\sqrt{1+\gamma_-^2}} & \frac{\gamma_- V^{+-}_{n+3,n}}{\sqrt{1+\gamma_-^2}} & \frac{\gamma_- V^{++}_{n+3,n+6}}{\sqrt{1+\gamma_-^2}} & \frac{\gamma_- V^{+-}_{n+3,n+6}}{\sqrt{1+\gamma_-^2}} \end{pmatrix}. \tag{40}$$

В итоге вблизи точки пересечения уровни имеют вид

$$E_- = \Lambda_- + (\frac{|V^{+-}_{n,n+3}|^2}{\Lambda_- - E^{-}_{n+3}} + \frac{|V^{++}_{n,n-3}|^2}{\Lambda_- - E^{+}_{n-3}} + \frac{|V^{+-}_{n,n-3}|^2}{\Lambda_- - E^{-}_{n-3}})\frac{1}{1+\gamma_-^2} + (\frac{|V^{+-}_{n+3,n}|^2}{\Lambda_- - E^{-}_{n}} + \frac{|V^{++}_{n+3,n+6}|^2}{\Lambda_- - E^{+}_{n+6}} + \frac{|V^{+-}_{n+3,n+6}|^2}{\Lambda_- - E^{-}_{n+6}})\frac{\gamma_-^2}{1+\gamma_-^2}, \tag{41}$$

$$E_+ = \Lambda_+ + (\frac{|V^{+-}_{n,n+3}|^2}{\Lambda_+ - E^{-}_{n+3}} + \frac{|V^{++}_{n,n-3}|^2}{\Lambda_+ - E^{+}_{n-3}} + \frac{|V^{+-}_{n,n-3}|^2}{\Lambda_+ - E^{-}_{n-3}})\frac{1}{1+\gamma_+^2} + (\frac{|V^{+-}_{n+3,n}|^2}{\Lambda_+ - E^{-}_{n}} + \frac{|V^{++}_{n+3,n+6}|^2}{\Lambda_+ - E^{+}_{n+6}} + \frac{|V^{+-}_{n+3,n+6}|^2}{\Lambda_+ - E^{-}_{n+6}})\frac{\gamma_+^2}{1+\gamma_+^2}, \tag{42}$$

где собственные числа матрицы A

$$\Lambda_{\pm} = \frac{E^{+}_{n+3} + E^{+}_{n}}{2} \pm \sqrt{(\frac{E^{+}_{n+3} - E^{+}_{n}}{2})^2 + |V^{++}_{n,n+3}|^2}. \tag{43}$$

Заметим, что величины $\gamma_{\pm}$ можно записать как $\gamma_{\pm} = \frac{(E^{+}_{n+3} - E^{+}_{n} \pm (\Lambda_+ - \Lambda_-))}{2V^{++}_{n,n+3}}$.

На Рис. 6 б) видна неприменимость обычной теории возмущений, связанная с пересечением уровней невозмущенных уровней. Как видно, улучшенная теория возмущений, по сути являющаяся блочным суммированием наиболее существенных вкладов в теории возмущений, более адекватно описывает явление расталкивания уровней. На Рис. 6 в) в окрестности точки пересечения невозмущенных уровней видно хорошее совпадение результата, полученного улучшенной теорией возмущений, с численной диагонализацией гамильтониана.

IV. УРОВНИ ЛАНДАУ: КВАЗИКЛАССИКА

Чтобы исследовать систему на больших энергиях, мы применяли квазиклассический подход. Основная идея в этой части работы - применить правила квантования Бора-Зоммерфельда, а именно

$$S = 2\pi l_H^{-2}(n+\gamma) \tag{44}$$

где S – площадь, ограниченная изоэнергетической кривой в k-пространстве, а n – целое число. В пренебрежение коммутатором $[k_x, k_y]$ квадрат гамильтониана приводит к тому же условию на изоэнергетическую поверхность, как и без поля, только теперь роль одного из импульсов играет координата в реальном пространстве. Площадь может быть выражена через плотность состояний в отсутствие поля. Фаза Берри $\gamma \sim 1$ зависит от вида гамильтониана и в случае двухзонных гамильтонианов вычислялась в работе[12]. В дальнейшем мы будем пренебрегать γ. Также мы будем пренебрегать зеемановским расщеплением, имея в виду малость g-фактора в топологических изоляторах.

При $0 < \epsilon < \min\{\epsilon_+(\alpha), 1/4\}$ в площадь имеется два вклада - от центральной части и бесконечных (в квазиклассическом приближении) "лепестков" (см. Рис. 3а), Рис. 4а), Рис. 5а)). Площадь центральной части равна

$$S_1 = \frac{\Delta^2}{2v^2}\Big[2\pi c_1 + 12\int_{c_1}^{x_1} dx\Big(\frac{1}{3}\arccos\frac{-\sqrt{(x+\epsilon)^2 - x}}{\sqrt{\alpha x^3}} - \frac{\pi}{6}\Big)\Big]. \tag{45}$$

Можно показать, что

$$\frac{\partial S_1}{\partial \epsilon} = 4\pi^2 \Delta g_1(\epsilon), \tag{46}$$

где $g_1(\epsilon)$ - вклад в плотность состояний от центральной части, а именно

$$g_1(\epsilon) = \frac{\Delta}{2\pi v^2} F_1(\epsilon, \alpha). \tag{47}$$

Площадь каждого раздельного лепестков равна

$$S_2 = \frac{\Delta^2}{v^2} \int_{x_2}^{+\infty} dx \Big(\frac{1}{3} \arccos \frac{-\sqrt{(x+\epsilon)^2 - x}}{\sqrt{\alpha x^3}} - \frac{\pi}{6} \Big) \tag{48}$$

Опять можно показать, что

$$\frac{\partial S_2}{\partial \epsilon} = \frac{2\pi^2 \Delta}{3} g_2(\epsilon), \tag{49}$$

где

$$g_2(\epsilon) = \frac{\Delta}{2\pi v^2} F_5(\epsilon, \alpha). \tag{50}$$

Заметим, что интеграл в ур. (48) расходится на верхнем пределе. Поэтому удобно записать его в виде:

$$S_2 = \frac{1}{6} S + \frac{\pi \Delta^2}{3 v^2} \int_0^{\epsilon} F_5(\epsilon', \alpha) d\epsilon'. \tag{51}$$

Здесь S суммарная площадь лепестков при $\epsilon = 0$.

В случае $\max\{0, \epsilon_+(\alpha)\} < \epsilon < 1/4$, имеется два линейно-связных куска (Рис. 5в)) – центральная часть и слившиеся лепестки, площадь центральной части определяется как выше (см. ур. (46)), площадь второй части будет

$$S_{2,3} = \frac{6\Delta^2}{v^2} \Big[\int_{x_2}^{c_2} dx \Big(\frac{1}{3} \arccos \frac{-\sqrt{(x+\epsilon)^2 - x}}{\sqrt{\alpha x^3}} - \frac{\pi}{6} \Big) + \int_{c3}^{+\infty} dx \Big(\frac{1}{3} \arccos \frac{-\sqrt{(x+\epsilon)^2 - x}}{\sqrt{\alpha x^3}} - \frac{\pi}{6} \Big) \Big] + \frac{\Delta^2}{2v^2} (2\pi c_3 - 2\pi c_2). \tag{52}$$

Опять,

$$\frac{\partial S_{2,3}}{\partial \epsilon} = 4\pi^2 \Delta g_{2,3}(\epsilon), \tag{53}$$

где

$$g_{2,3}(\epsilon) = \frac{\Delta}{2\pi v^2} (F_2(\epsilon, \alpha) + F_3(\epsilon, \alpha)). \tag{54}$$

Также, удобно записать $S_{2,3}$ в виде:

$$S_{2,3} = S + \frac{2\pi \Delta^2}{v^2} \int_0^{\epsilon} \Big[F_2(\epsilon', \alpha) + F_3(\epsilon', \alpha) \Big] d\epsilon'. \tag{55}$$

Для $\epsilon_-(\alpha) < \epsilon$ (при $\alpha < \alpha_0$), $1/4 < \epsilon < \epsilon_+(\alpha)$ и $\epsilon_-(\alpha) < \epsilon$ (при $\alpha_0 < \alpha < \alpha_c$) и $1/4 < \epsilon$ (при $\alpha_c < \alpha$) (см. Рис. 3 в и г, Рис. 4в), д) и Рис. 5е)) имеем случай одной линейно-связной площади (см. Рис. 4г) и д)) с площадью

$$S_3 = \frac{\Delta^2}{2v^2} (2\pi c_1) + \frac{6\Delta^2}{v^2} \int_{c_1}^{+\infty} dx \Big(\frac{1}{3} \arccos \frac{-\sqrt{(x+\epsilon)^2 - x}}{\sqrt{\alpha x^3}} - \frac{\pi}{6} \Big). \tag{56}$$

При $\max\{1/4, \epsilon_+(\alpha)\} < \epsilon < \epsilon_-(\alpha)$ (см. Рис. 4г) и Рис. 5д)) общая площадь области определяется как

$$S_3 = \frac{6\Delta^2}{v^2} \Big[\int_{c_1}^{c_2} dx \Big(\frac{1}{3} \arccos \frac{-\sqrt{(x+\epsilon)^2 - x}}{\sqrt{\alpha x^3}} - \frac{\pi}{6} \Big) + \int_{c_3}^{+\infty} dx \Big(\frac{1}{3} \arccos \frac{-\sqrt{(x+\epsilon)^2 - x}}{\sqrt{\alpha x^3}} - \frac{\pi}{6} \Big) \Big] + \frac{\Delta^2}{2v^2} 2\pi (c_1 + c_3 - c_2). \tag{57}$$

В итоге во всех случаях

$$\frac{\partial S_3}{\partial \epsilon} = 4\pi^2 \Delta g(\epsilon), \qquad S_3 = S + 4\pi^2 \Delta \int_0^\epsilon d\epsilon' g(\epsilon'), \tag{58}$$

где $g(\epsilon)$ – полная плотность состояний.

В случае $\epsilon < 0$ площадь определяется соотношением

$$\frac{\partial S}{\partial \epsilon} = 4\pi^2 \Delta (g_2(\epsilon) - g_1(\epsilon)). \tag{59}$$

где $g_2(\epsilon)$ и $g_1(\epsilon)$ - вклады в плотность состояний от лепестков и центральной части соответственно. Обратим внимание, что в S_2, $S_{2,3}$ и S_3 присутствует формально бесконечный вклад, обозначенный S, который является площадью лепестков при $\epsilon = 0$. Обнаруженная ранее особенность плотности состояний при $\epsilon = 1/4$ графически выражается в слиянии центральной областей и "лепестков" при этой энергии.

В рамках квазиклассического приближения, без учета явления магнитного пробоя[13], в случаях существования отдельных лепестков возникают шестикратно вырожденные уровни. Вблизи точек особенностей плотности состояний в нулевом поле, можно найти поведение квазиклассических уровней энергии. Интегрирование асимптотики плотности состояний (15) вблизи энергии $\epsilon = 1/4$ дает уравнение на спектр

$$\frac{8\Delta^2}{\sqrt{\alpha} v^2} |\epsilon - 1/4| \ln \frac{1}{|\epsilon - 1/4|} \approx 2\pi l_H^{-2} (n + n_0). \tag{60}$$

Вблизи второй особенности $\epsilon = \epsilon_+(\alpha)$:

$$\frac{\pi |\epsilon_+(\alpha) + c_1| |\epsilon - \epsilon_+(\alpha)| \Delta^2}{v^2 [(\epsilon_+(\alpha) + c_1)^2 - c_1]^{1/2} [1 - 3\alpha(1 - 2\epsilon_+(\alpha))]^{1/4}} \ln \frac{1}{|\epsilon - \epsilon_+(\alpha)|} \approx 2\pi l_H^{-2} (n + n_0'). \tag{61}$$

Здесь n_0 и n_0' – неизвестные, определяемые площадью лепестков при $\epsilon = 0$ и регулярной частью $g(\epsilon)$ вблизи особенности. Тогда находим

$$|\epsilon - \epsilon_\kappa| \approx \frac{\kappa(n + n_\kappa)}{\ln[1/[\kappa(n + n_\kappa)]]}, \tag{62}$$

где в случае первой особенности

$$\epsilon_\kappa = \frac{1}{4}, \qquad \kappa = \frac{\pi \sqrt{\alpha} v^2}{4 l_H^2 \Delta^2}, \qquad n_\kappa = n_0 \tag{63}$$

и в случае второй

$$\epsilon_\kappa = \epsilon_+(\alpha), \qquad \kappa = \frac{2v^2 [(\epsilon_+(\alpha) + c_1)^2 - c_1]^{1/2} [1 - 3\alpha(1 - 2\epsilon)]^{1/4}}{\Delta^2 l_H^2 |\epsilon_+(\alpha) + c_1|}, \qquad n_\kappa = n_0'. \tag{64}$$

Общее же выражение для спектра не интегрируется аналитически, поэтому мы рассмотрели спектр численно. На Рис. 7 показаны площади центральной части и лепестков для $\epsilon < 1/4$ и суммарная площадь после слияния. Три ветви отличаются множителями 1, 1/2, 1/3, что соответствует трем сериям уровней k, 2k, 3k при некотором $k \gg 1$, определяемом масштабом выбора оси y. Неизвестная формально бесконечная площадь лепестков при $\epsilon = 0$ даёт относительный сдвиг уровней по вертикальной оси.

В предельном случае $|m| \to \infty$ можно проанализировать спектр в случае большого значения безразмерной энергии $E/E_0 \gg 1$. В этом случае есть только поверхность Ферми односвязанная и включающая точку $\boldsymbol{k} = 0$. В этом случае площадь

$$S(E) = \frac{\pi E_0^2}{v^2} f(E/E_0), \tag{65}$$

где

$$f(z) = z^2 y_z \left(1 + \frac{2}{\pi} \int_1^{1/y_z} du \arcsin \frac{\sqrt{1 - y_z u}}{z^2 y_z^{3/2} u^{3/2}} \right), \tag{66}$$

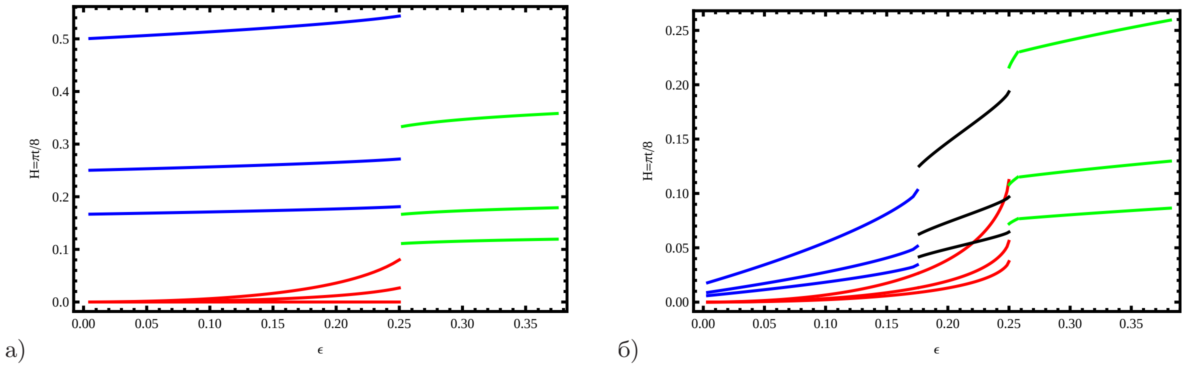


Рис. 7: Спектр в квазиклассике, $\epsilon > 0$, (a) $\alpha = 2$, (b) $\alpha = 0.4$. Красный - ветви центральной части, синий - лепестки, зеленый - вся площадь после слияния, черный - слившиеся лепестки. Функции для лепестков сдвинуты вверх на 0.5 и 0.1 соответственно, отвечающую площади их при $\epsilon = 0$. Большие площади слившихся лепестков (б) и слившихся центральной части и лепестков (а и б) поделены на 10 (а) и 5 (б), что соответствует увеличению номера уровня в 10 и 5 раз соответственно

где y_z - решение уравнения $y + z^4 y^3 = 1$. Для $z \gg 1$ находим, что $y_z \approx z^{-4/3} - z^{-8/3}/3$. Тогда в случае $z \gg 1$ получаем,

$$f(z) \simeq z^{2/3}\Big(1 + \frac{2}{\pi} h(z^{4/3})\Big), \tag{67}$$

где

$$h(t) = \int_1^t du \arcsin \frac{\sqrt{1 - u/t}}{u^{3/2}}. \tag{68}$$

Два главных порядка асимптотического разложения интеграла дают

$$f(z) \simeq \frac{6}{\sqrt{\pi}} \frac{\Gamma(7/6)}{\Gamma(2/3)} z^{2/3} - 2. \tag{69}$$

То есть для спектра при $n \gg E_0^2 l_H^2 / v^2$ получаем

$$|E_n| \simeq E_0 \left(\frac{\sqrt{\pi}\Gamma(2/3)}{3\Gamma(7/6)}\right)^{3/2} \left(\frac{v^2 n}{E_0^2 l_H^2}\right)^{3/2} \left[1 + \frac{3}{2}\frac{E_0^2 l_H^2}{v^2 n}\right]. \tag{70}$$

V. ЧИСЛЕННАЯ ДИАГОНАЛИЗАЦИЯ ГАМИЛЬТОНИАНА

Остается вопрос, как изначальные уровни, все идущие к $-\infty$, посредством возмущения дают квазиклассическую картину, в которой, согласно вышеизложенному, есть две симметричных ветви, идущих к $\pm\infty$. Чтобы понять это, мы численно диагонализовали гамильтониан (18), обрезанный номером уровня $n = 100$. Из графиков на Рис. 8 мы видим, что, во-первых, возмущение снимает вырождение в невозмущенных уровнях, а во-вторых, что действительно старые уровни начинают уходить в положительные энергии, как получается в квазиклассике. Уровни, уходящие изначально вниз, дают отрицательную ветвь спектра квазиклассики. Обратим внимание, что уровни Ландау с энергиями $\epsilon > 1/4$ группируются по шесть.

VI. ОБСУЖДЕНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

В наиболее свежей работе для топологического изолятора с наиболее сильным на данный день гексагональным искажением (Bi_2Te_3) были экспериментально определены следующие численные значения для параметров гамильтониана (1): $m = -0.3\, m_e$, $v = 3.8$ eV$\cdot$ Å, $\lambda = 210$ eV$\cdot$ Å^3, что дает следующие оценки для введенных нами масштабов $\Delta = 1.1$ eV, $E_0 = 0.51$ eV, и $\alpha = 21.6$. То есть, по-видимому, мы с запасом имеем дело со случаем одной логарифмической особенности плотности состояний. Плотность состояний в зависимости от химического

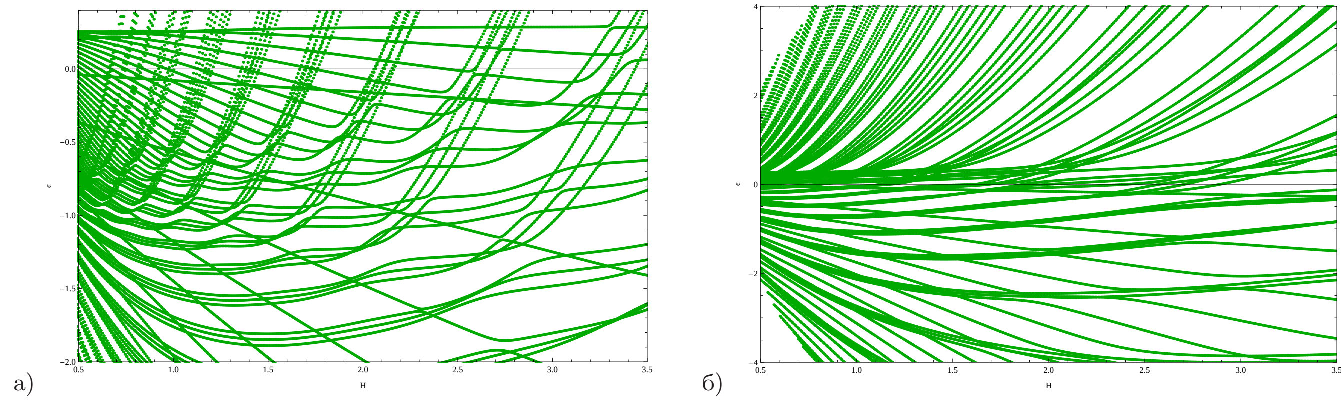


Рис. 8: Найденный численно спектр уровней Ландау для а) $\alpha = 0.4$, б) $\alpha = 2$.

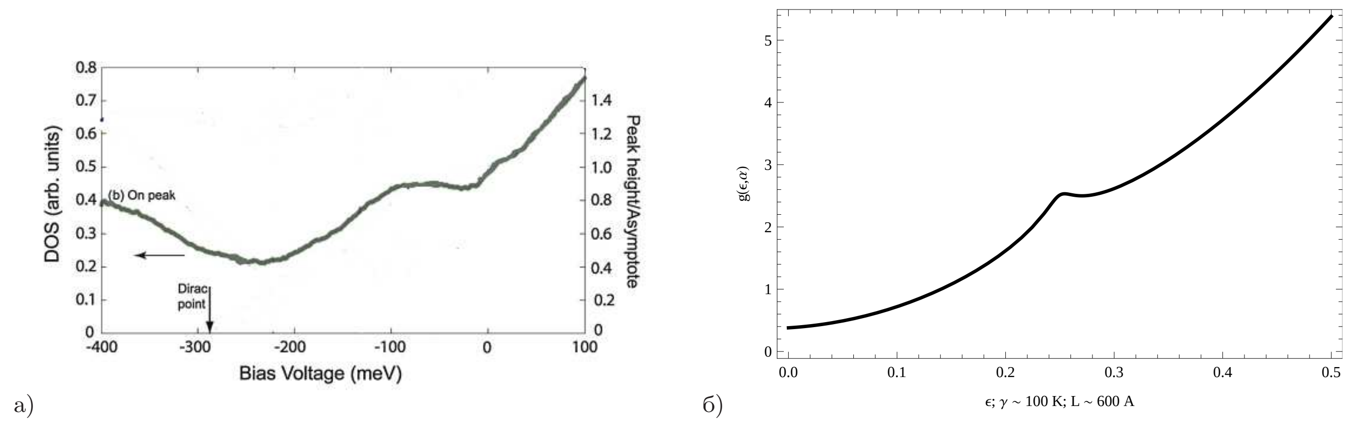


Рис. 9: а) Экспериментально измеренная плотность состояний и б) полученная в нашей модели

потенциала (приложенного напряжения) измерялась в работе[6]. Зависимость из этой работы (Рис. 9а) имеет помимо монотонного хода заметное плато. Такая же ступенька наблюдалась в экспериментах группы Родичева[14]. Такое поведение плотности состояний может быть как раз связано с вышеупомянутой логарифмической особенностью. Действительно, в силу формулы (см. например,[15])

$$I(V) = 4\pi e|t|^2 \int dE \nu(E) \nu_{STM}(E+eV) \left[f_F(E) - f_F(E+eV)\right], \tag{71}$$

где $f_F(E) = 1/[1+\exp((E-\mu)/T)]$ – фермиевская функция распределения (t – амплитуда туннельного перехода, T – температура, μ – химический потенциал, V – напряжение в игле), дифференциальный кондактанс dI/dV пропорционален при низких температурах, $T \ll eV$, плотности состояний образца $\nu(E)$. Если принять, что основной ход кривой зависимости туннельной плотности состояний в эксперименте обусловлен вкладом объемных состояний с линейным спектром $E = v_{\rm bulk} k$ (в силу сильного спин-орбитального взаимодействия в объеме; представляется правдоподобным, что $v_{\rm bulk} \sim v$), а основной вклад поверхностных состояний связан с логарифмической особенностью, то плотность состояний можно записать как

$$\nu(E) = a\epsilon^2 + c \ln \frac{1}{\sqrt{(\epsilon - 1/4)^2 + d^2}}. \tag{72}$$

Здесь первый член связан с объемным спектром, постоянная $a = \frac{\Delta^2 L_z}{2\pi^2 v_{\rm bulk}^3}$, где L_z – эффективная толщина образца (вклад в туннельный ток объема), коэффициент $c = \frac{2\Delta}{\pi^2 v^2 \sqrt{\alpha}}$ определяется формулой (15), а коэффициент d может быть, например, связан с размытием из-за беспорядка, $d \sim \Gamma/\Delta$: пространственные флуктуации дираковской точки в спектре с характерным масштабом Γ усредняются по пятну, определяемому эффективным размером иглы (порядка 1 нм в эксперименте группы Родичева). Заметим, что в условиях экспериментов как группы Капитульника[6] так и группы Родичева[14] температурное размытие в дифференциальном кондактансе недостаточно для объяснения получаемой картины. Как видно из Рис. 9а размытие максимума около ступеньки составляет несколько десятков meV, а температура в эксперименте[6] была только около 10 K. Из Рис. 9б видно, что модельная плотность состояний (72) дает похожую на эксперимент зависимость.

Также, в экспериментах группы Родичева[14] наблюдалась картина уровней Ландау схожая с полученной на Рис. 8б, что может свидетельствовать о подходящем выборе модельного гамильтониана.

VII. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В итоге, в работе был произведен по возможности полный анализ плотности состояний в нулевом магнитном поле и уровней Ландау в случае перпендикулярного магнитного поля для модельного гамильтониана (1), выведенного в работе[10]. Было получено, что при любом отличном от нуля параметре гексагонального искажения в плотности состояний имеется логарифмическая особенность, в некотором интервале параметров появляется и вторая, а также в плотности состояний имеется скачок в том же интервале параметров. Структура уровней Ландау с учетом гексагонального искажения и конечной массы была проанализирована в рамках теории возмущений и в квазиклассическом приближении. Полученные результаты были подтвержденны с помощью численной диагонализации гамильтониана.

1. M. Z. Hasan, C. L. Kane, Rev. Mod. Phys. **82**, 3045 (2010).
2. Xiao-Liang Qi, Shou-Cheng Zhang, Rev. Mod. Phys. **83**, 1057 (2011).
3. M. Nomura, S. Souma, A. Takayama, T. Sato, T. Takahashi, K. Eto, Kouji Segawa, Yoichi Ando, Phys. Rev. B **89**, 045134 (2014).
4. A. A. Schafgans, K. W. Post, A. A. Taskin, Yoichi Ando, Xiao-Liang Qi, B. C. Chapler, D. N. Basov, Phys. Rev. B **85**, 195440 (2011).
5. Yeping Jiang, Yilin Wang, Mu Chen, Zhi Li, Canli Song, Ke He, Lili Wang, Xi Chen, Xucun Ma, Qi-Kun Xue1, Phys. Rev. Lett. **108**, 016401 (2010).
6. Zhanybek Alpichshev, J. G. Analytis, J.-H. Chu, I. R. Fisher, A. Kapitulnik, Phys. Rev. B **84**, 041104 (2011).
7. P. Sessi, M. M. Otrokov, T. Bathon, M. G. Vergniory, S. S. Tsirkin, K. A. Kokh, O. E. Tereshchenko, E. V. Chulkov, M. Bode, Phys. Rev. B **88**, 161407 (2013).
8. Chao-Xing Liu, Xiao-Liang Qi, HaiJun Zhang, Xi Dai, Zhong Fang, Shou-Cheng Zhang, Phys. Rev. B **82**, 045122 (2010).
9. Zhihua Yang, Jung Hoon Han, Phys. Rev. B **83**, 045415 (2011).
10. Liang Fu, Phys. Rev. Lett. **103**, 266801 (2009).
11. Yu. A. Bychkov and E. I. Rashba, JETP Lett. **39**, 78 (1984); J. Phys. C: Sol. State Phys. **17**, 6039 (1984).
12. Л.А. Фальковский, ЖЭТФ **49**, 609 (1965).
13. И.М. Лифшиц, М.Я. Азбель, М.И. Каганов, “Электронная теория металлов”, М.: Наука (1971).
14. В. Столяров, личное сообщение.
15. Л.С. Левитов, А.В. Шитов, “Функции Грина. Задачи и решения”, М.: Физматлит (2003).