

Министерство общего и профессионального образования
Российской Федерации
Московский физико-технический институт (Государственный
Университет)

Бакалаврский диплом

**Электронные состояния на дислокациях в
топологическом изоляторе.**

Студент 628 гр. Светличный П.М.

Научный руководитель:
д.ф.-м.н. Иоселевич А.С.

Москва, 2010г.

Содержание

| | | |
|---|---|----|
| 1 | Предпосылки | 3 |
| 2 | Топологический изолятор и обращение времени | 3 |
| 3 | Связь свойств поверхностных состояний с TRP | 4 |
| 4 | Z_2 топологические инварианты | 5 |
| 5 | Модель сильной связи | 7 |
| 6 | Решетка алмаза | 8 |
| 7 | Дислокации | 11 |

1 Предпосылки

Изучение влияния спин-орбитального взаимодействия (SOI) привело к открытию веществ, названных топологическими изоляторами. В двумерных системах SOI приводит к спиновому эффекту Холла (QSH), который наблюдался в GaAs. Также было предсказано, что в присутствии SOI графен тоже демонстрирует этот эффект. В фазе QSH в спектре возбуждений существуют бесщелевые состояния, различные по направлению спина. Фаза QSH отличается от обычного зонного изолятора так называемым Z_2 топологическим инвариантом.

Эти результаты обобщаются на трехмерный случай. В 3D случае присутствуют четыре Z_2 инварианта. Один из этих инвариантов особенно важен, так как отличает так называемые “сильный” (STI) и “слабый” (WTI) топологические изоляторы. Наличие беспорядка разрушает WTI фазу и изолятор становится обычным зонным, в то время как STI фаза к беспорядку устойчива. WTI и STI фазы имеют поверхностные состояния с четным и нечетным количеством дираковских узлов соответственно, вблизи которых энергия зависит от квазиимпульса линейно.

2 Топологический изолятор и обращение времени

Понятие топологического изолятора сильно связано с процедурой обращения времени и таким понятием как поляризация относительно обращения времени (time reversal polarization - TRP). Введем это и еще несколько других понятий основываясь на статье [2]. Рассмотрим топологический изолятор в размерностях 2 и 3. В обоих случаях гамильтониан \mathcal{H} будет обратим по времени, т.е. $[\mathcal{H}, \Theta] = 0$. Оператор Θ - это оператор обращения времени, $\Theta = \exp(i\pi S_y) K$, K - комплексное сопряжение, S_y - оператор спина. Для частиц со спином $\frac{1}{2}$ оператор Θ удовлетворяет соотношению

$$\Theta^2 = \exp\left(i\pi\frac{\sigma_y}{2}\right) K \exp\left(i\pi\frac{\sigma_y}{2}\right) K = i\sigma_y (-i\sigma_y^*) = -\sigma_y^2 = -1.$$

Перейдем к функциям Блоха $|\psi_{n,\mathbf{k}}\rangle = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} |u_{n,\mathbf{k}}\rangle$. Функции $|u_{n,\mathbf{k}}\rangle$ здесь периодические с периодом решетки. Для этих функций гамильтонианом будет:

$$H(\mathbf{k}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \mathcal{H} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}}.$$

Сопрягая $H(\mathbf{k})$ оператором обращения времени, получаем:

$$H(-\mathbf{k}) = \Theta H(\mathbf{k}) \Theta^{-1}.$$

Введем теперь термин - квазиимпульс инвариантный по отношению к обращению времени (time reversal invariant momentum - TRIM). Это точки Γ_i в зоне Бриллюэна, для которых $-\Gamma_i = \Gamma_i + \mathbf{G}$, \mathbf{G} - вектор обратной решетки. В этих точках $H(\Gamma_i) = \Theta H(\Gamma_i) \Theta^{-1}$. Эти 4 (2D) или 8 (3D) точек могут быть представлены в виде $\Gamma_{i=(n_1 n_2 n_3)} = \frac{1}{2}(n_1 \mathbf{b}_1 + n_2 \mathbf{b}_2 + n_3 \mathbf{b}_3)$, где $n_j = 0, 1$ (2D - $n_3 = 0$), \mathbf{b}_i - элементарные вектора обратной

решетки. Поверхностным TRIM для поверхности, перпендикулярной \mathbf{G} будут соответствовать два Γ_i , отличающиеся на $\mathbf{G}/2$ (рис.1).

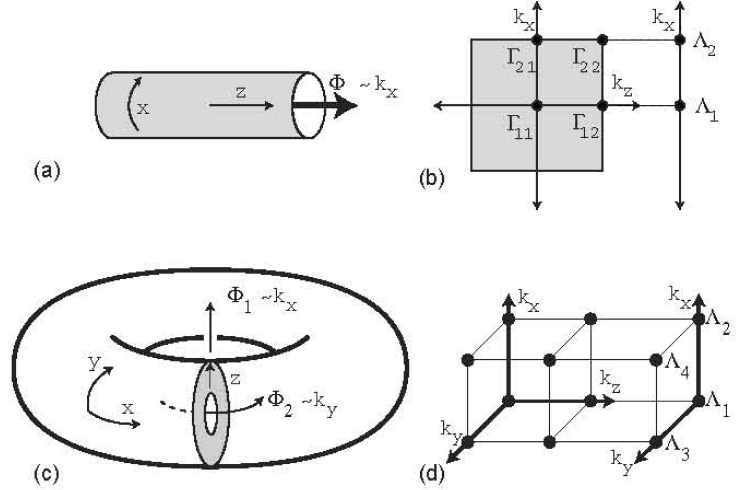


Рис.1

(a) Двумерный цилиндр с потоком Φ , пропущенным сквозь него (аналогия с экспериментом Лафлина). Роль потока играет проекция квазиимпульса на ось x . (b) Поверхностные TRIM Λ_1 и Λ_2 являются проекциями пар объемных TRIM Γ_i . (c) Обобщение 2D случая на 3D случай. Показан обобщенный цилиндр. (d) Объемные и поверхностные TRIM для 3D случая. (Из статьи [2])

3 Связь свойств поверхностных состояний с TRP

Проведем теперь мысленный эксперимент, аналогичный эксперименту Лафлина. Для 2D случая он более нагляден. Мысленно “свернем” топологический изолятор в цилиндр с осью, параллельной вектору \mathbf{G} , а длина окружности равна постоянной решетки (рис.1a). Тогда магнитный поток, присутствовавший в эксперименте Лафлина соответствует квазиимпульсу k_x , а его значения $\Phi = 0$ и $\Phi = \frac{h}{2e}$ - двум TRIM $k_x = \Lambda_1$ и $k_x = \Lambda_2$. Инвариант Z_2 характеризует изменение крамерсовской вырожденности основного состояния системы между $k_x = \Lambda_1$ и $k_x = \Lambda_2$. Поясним последнее утверждение. При $k_x = \Lambda_1$ и $k_x = \Lambda_2$ энергетический уровень, соответствующий поверхностному состоянию двукратно вырожден. Но существуют два вида спектра между Λ_1 и Λ_2 (рис.2). На рис.2a состояния “меняют партнеров”, а на рис.2b - нет. Пусть при Λ_1 основное (многочастичное) состояние системы невырождено и заняты все состояния вплоть до и включая дублет ε_{a1} .

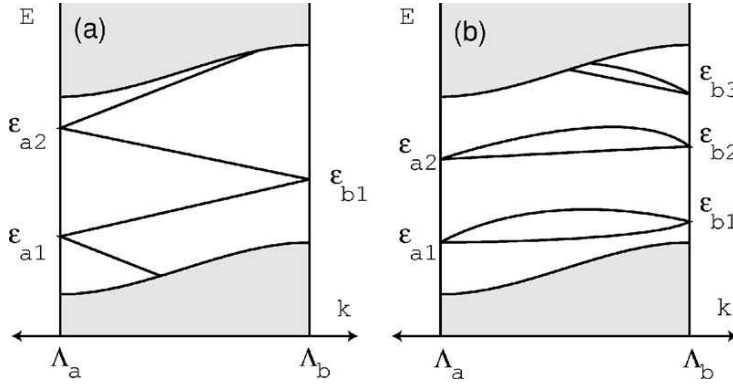


Рис.2

Схематическое изображение энергетических уровней поверхностных состояний. Закрашены области спектра, соответствующие объемным состояниям. В случае (a) на пути в зоне Бриллюэна, соединяющем Λ_a и Λ_b TRP изменяется, в случае (b) - нет. (Из статьи [2])

Изменим теперь адиабатически поток до значения Λ_2 . Дублет ε_{b1} окажется заполнен наполовину, и возникнет крамерово вырождение основного состояния. На рис.2b вырождения не возникает. Эти два случая различаются изменением TRP при изменении потока. TRIM Λ_1 и Λ_2 характеризуются значениями TRP π_1 и π_2 соответственно (ниже эти величины будут определены из свойств объемных состояний), $\pi_{1,2} = \pm 1$ (определена по модулю 2), и в случае $\pi_1\pi_2 = -1$ спектр будет как на рис.2a, в обратном - как на рис.2b.

Для трехмерного топологического изолятора можно проделать похожие рассуждения. Для него будут 8 TRIM и по 4 поверхностных TRIM для различных поверхностей. Это показано на рис.3, на котором TRIM проектируются на плоскость, перпендикулярную оси z . Парные произведения TRP и здесь будут указывать на характер изменения спектра на пути в зоне Бриллюэна, соединяющем TRIM.

4 Z_2 топологические инварианты

Прежде чем продолжить разговор о значениях топологических инвариантов, дадим им, наконец, аналитические выражения. Не будем останавливаться на их выводе и воспользуемся результатами статьи [7]. Проще всего выразить топологические инварианты через величины $\delta_i = \sqrt{\det[w(\Gamma_i)]} / \text{Pf}[w(\Gamma_i)] = \pm 1$ (попросту знак пфаффиана), $w_{ij}(\mathbf{k}) = \langle u_i(-\mathbf{k}) | \Theta | u_j(\mathbf{k}) \rangle$, $u_i(\mathbf{k})$ - волновые функции в представлении Блоха.

Тогда выражения для топологических инвариантов принимают вид:
для 2D случая:

$$(-1)^\nu = \prod_{i=1}^4 \delta_i$$

для 3D случая:

$$(-1)^{\nu_0} = \prod_{n_j=0,1} \delta_{n_1 n_2 n_3}$$

$$(-1)^{\nu_{i=1,2,3}} = \prod_{n_j \neq i=0,1; n_i=1} \delta_{n_1 n_2 n_3}$$

Для величин δ_i также справедливо выражение:

$$\delta_i = \prod_{m=1}^N \xi_{2m}(\Gamma_i) \quad (1)$$

Здесь m - номер зоны. Всего занято $2N$ зон. Зоны занумерованы так, что при $\mathbf{k} = \Gamma_i$ состояния в зонах с номерами $2m$ и $2m - 1$ составляют дублет Крамерса.

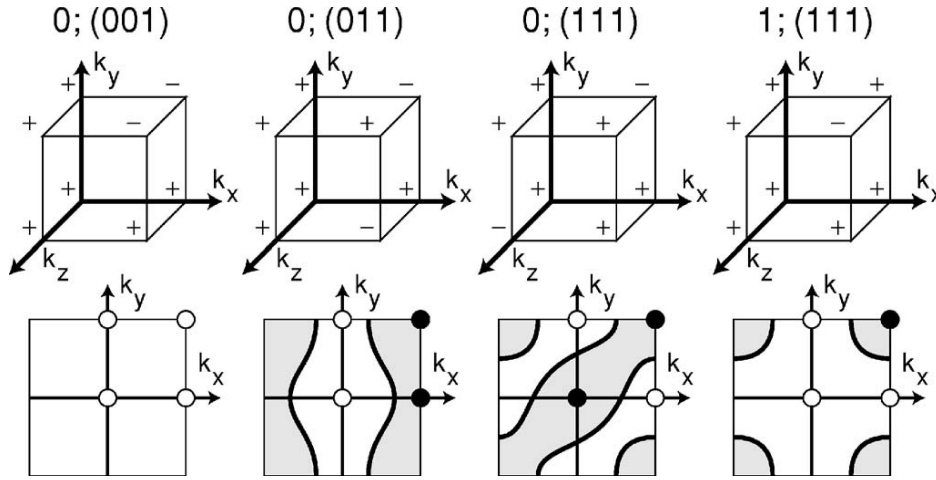


Рис.3

Диаграммы, показывающие фазы, соответствующие различным наборам $\nu_0; (\nu_1 \nu_2 \nu_3)$. В верхнем ряду показаны знаки δ_i в точках Γ_i , находящихся в вершинах куба. В нижнем ряду показаны зоны Бриллюэна для поверхности 001 для каждой фазы. Закрашенными кружками обозначены TRIM, для которых $\pi_a = -1$. Линия является кривой Ферми, разделяющей части зоны Бриллюэна для которых знаки TRP для TRIM, находящихся в них, различны. (Из статьи [2])

Чтобы привязать инварианты (ν_1, ν_2, ν_3) к векторам обратной решетки формируют вектор $\mathbf{G}_\nu = \sum_i \nu_i \mathbf{b}_i$.

На рис.3 изображены топологические классы, обозначенные соответственно с $\nu_0; (\nu_1 \nu_2 \nu_3)$, для трехмерного топологического изолятора, который характеризуется восемью значениями δ_i для Γ_i . Ниже показаны зоны Бриллюэна для поверхностных состояний, с четырьмя Λ_a , закрашенными или пустыми в зависимости от знака $\pi_a = \delta_{i=(a1)} \delta_{i=(a2)}$.

Структура спектра поверхностных состояний будет напоминать случай на рис.2а на кривых, соединяющих два кружка разного типа, и рис.2b в противном случае. Заметим, что инварианты ν_i имеют вид $\nu_i = \pi_a \pi_b$. К примеру, инвариант $\nu_1 = \pi_{10} \pi_{11}$ в соответствии с обозначением $\pi_{n_1 n_2} \leftrightarrow \Lambda_{n_1 n_2} = n_1 \frac{b_x}{2} + n_2 \frac{b_y}{2}$. Знак произведения $\pi_a \pi_b$ показывает четность количества пересечений уровня Ферми и уровней поверхностных состояний на пути в зоне Бриллюэна между Λ_a и Λ_b (четное $\leftrightarrow -1$, нечетное $\leftrightarrow 1$). Поэтому зону Бриллюэна можно разделить на две части кривой Ферми (аналог поверхности Ферми в двухмерном случае). В одной части будут находиться TRIM Λ_a с $\pi_a = -1$, в другой - с $\pi_a = 1$ (см. рис.3b). Четность числа пересечений не может быть изменена никаким адиабатическим изменением гамильтониана. Об инварианте ν_0 можно сказать, что он имеет смысл четности числа точек, окруженных кривой Ферми (см. рис.3b).

Рассмотрим устойчивость топологических инвариантов к появлению беспорядка. Вслед за авторами статьи [2] посмотрим, как удвоение элементарной ячейки скажется на инвариантах.

В 2D случае переход к большей ячейки заключается, что область между Λ_a и Λ_b “сложится пополам”. После добавления малого случайного потенциала “случайные” вырождения между новыми TRIM снимутся, но вырождение, связанное с обращением времени останется. При этом картина соединения уровней (рис.2а или рис.2b) сохранится. Следовательно и инвариант ν сохранится.

Для 3D случая инвариант ν_0 также устойчив к увеличению элементарной ячейки, так как четность числа точек, окруженных кривой Ферми, при такой процедуре сохраняется. Инварианты же ν_k не сохраняются, так как для случае кривой Ферми, охватывающей 2 TRIM, дираковские узлы могут наложиться друг на друга, а случайный потенциал снимет это вырождение и откроет щель в спектре.

5 Модель сильной связи

Перейдем непосредственно к изучению гамильтониана, представляющего пример TI. Но прежде чем написать конкретный гамильтониан, выведем некоторые соотношения, относящиеся к гамильтонианам рассматриваемого типа. Будем опираться на статью [2].

Будет рассмотрен гамильтониан для модели сильной связи с 4 зонами, возникающими из четырех степеней свободы на кристаллическую ячейку. Каждая ячейка будет состоять из двух подрешеток, с которыми свяжем матрицу Паули σ^z . С спиновой степенью свободы свяжем матрицу s^z . Нам понадобится оператор инверсии \hat{P} . Так как инверсия поменяет местами подрешетки и не затронет спин, то оператором инверсии будет $P = \sigma^x \otimes I$ (I - единичная матрица по спиновым индексам). Оператор обращения времени примет вид $\Theta = i(I \otimes s^y) K$, где K - комплексное сопряжение, I - единичная матрица теперь уже в подрешеточных индексах.

Гамильтониан в представлении Блоха обладает свойствами:

$$H(\mathbf{k} + \mathbf{G}) = H(\mathbf{k})$$

$$H(-\mathbf{k}) = PH(\mathbf{k})P^{-1}$$

Оба свойства очевидны. В точках TRIM:

$$H(\Gamma_i) = PH(\Gamma_i)P^{-1}, \text{ откуда}$$

$$[H(\mathbf{k} = \Gamma_i), P] = 0. \quad (2)$$

Гамильтониан удобно представить в виде суммы матриц 4×4 ([2]): единичной матрицы I , пяти матриц Дирака Γ^a и их десяти коммутаторов $\Gamma^{ab} = \frac{1}{2i} [\Gamma^a, \Gamma^b]$. Матрицы Дирака удовлетворяют соотношению $\Gamma^a \Gamma^b + \Gamma^b \Gamma^a = 2\delta_{ab}I$. Их можно выбирать по-разному, но нам будет удобен выбор, при котором матрицы четны при сопряжении оператором $P\Theta$. Тогда 5 матриц Дирака:

$$\Gamma^{(1,2,3,4,5)} = (\sigma^x \otimes I, \sigma^y \otimes I, \sigma^z \otimes s^x, \sigma^z \otimes s^y, \sigma^z \otimes s^z)$$

При таком выборе коммутаторы будут нечетны $(P\Theta)\Gamma^{ab}(P\Theta)^{-1} = -\Gamma^{ab}$ (под действием оператора Θ мнимая единица i в определении Γ^{ab} меняет знак). Заметим также, что $\Gamma^1 = P$. Из условия выбора матриц Дирака следует:

$$(P\Theta)\Gamma^a(P\Theta)^{-1} = \Gamma^a$$

$$\text{Откуда получаем } \Theta\Gamma^a\Theta^{-1} = P\Gamma^aP^{-1} = \begin{cases} +\Gamma^a & \text{при } a = 1 \\ -\Gamma^a & \text{при } a \neq 1 \end{cases} \text{ (это легко проверить}$$

напрямую).

Гамильтониан должен быть четным при одновременном обращении времени и инверсии. Следовательно $[H(\mathbf{k}), P\Theta] = 0$. Из этого условия следует, что в наиболее общем случае гамильтониан представляется в виде:

$$H(\mathbf{k}) = d_0(\mathbf{k})I + \sum_{a=1}^5 d_a(\mathbf{k})\Gamma^a. \quad (3)$$

В точках $\mathbf{k} = \Gamma_i$ только $\Gamma^1 = P$ четна, и согласно свойству (2):

$$H(\mathbf{k} = \Gamma_i) = d_0(\mathbf{k} = \Gamma_i)I + d_1(\mathbf{k} = \Gamma_i)P.$$

Исходя из формулы (1) можно теперь найти δ_i :

$$\delta_i = -\text{sign}(d_1(\mathbf{k} = \Gamma_i))$$

Также возьмем из статьи [2] результат для энергетических уровней:

$$E(\mathbf{k}) = d_0(\mathbf{k}) \pm \sqrt{\sum_a d_a(\mathbf{k})^2}$$

6 Решетка алмаза

Рассмотрим теперь конкретный пример гамильтониана с указанными выше свойствами, который и будем впоследствии изучать. Это гамильтониан в приближении сильной связи на решетке алмаза (рис.4):

$$\mathcal{H} = t \sum_{\langle ij \rangle} c_i^\dagger c_j + i \frac{8\lambda_{SO}}{a^2} \sum_{\langle ij \rangle} c_i^\dagger \mathbf{s} \cdot (\mathbf{d}_{ij}^1 \times \mathbf{d}_{ij}^2) c_j \quad (4)$$

Первый член в гамильтониане отвечает за перескоки между ближайшими соседями. Второй член соединяет соседей второго порядка с амплитудой, зависящей от спина. Символами $\mathbf{d}_{ij}^{1,2}$ обозначены вектора вдоль связей, соединяющих узлы i . Напомним, что решетка алмаза представляет собой две гранецентрированные кубические решетки, сдвинутые друг относительно друга на $\frac{1}{4}$ диагонали (рис.4).

Представим этот гамильтониан в виде(3). Результаты для коэффициентов d_i возьмем из статьи [2]. Их можно получить сделав фурье-преобразование гамильтониана (4) и взяв суммы по подрешеткам для различных значений подрешеточных и спиновых индексов. Результаты представлены в таблице (5).

$$\begin{aligned} d_0 & 0 \\ d_1 & t + \delta t_1 + t (\cos x_1 + \cos x_2 + \cos x_3) \\ d_2 & t (\sin x_1 + \sin x_2 + \sin x_3) \\ d_3 & \lambda_{SO} (\sin x_2 - \sin x_3 - \sin(x_2 - x_1) + \sin(x_3 - x_1)) \\ d_4 & \lambda_{SO} (\sin x_3 - \sin x_1 - \sin(x_3 - x_2) + \sin(x_1 - x_2)) \\ d_5 & \lambda_{SO} (\sin x_1 - \sin x_2 - \sin(x_1 - x_3) + \sin(x_2 - x_3)) \end{aligned} \quad (5)$$

Зная коэффициенты d_i , получаем спектр (рис.5). Силу связи (111) приходится изменить на малую величину δt_1 , иначе спектр получается бесщелевым, зоны касаются в 3 неэквивалнтных точках $X^r = \frac{2\pi}{a} \hat{r}$, где $r = x, y, z$, и величины δ_i в этих точках оказываются неопределенными ($d_1(X^r) = 0$). Таким образом значение $\delta t_1 = 0$ разделяет различные классы топологических изоляторов. Все это представлено на рис.5 из статьи [1].

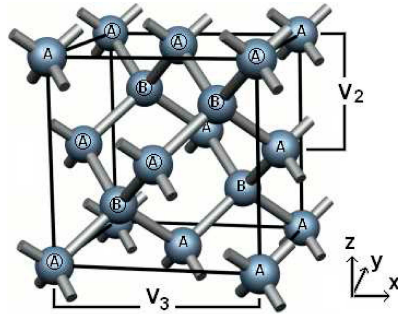


Рис.4

Решетка алмаза. Буквами лбозначены 2 различные подрешетки.

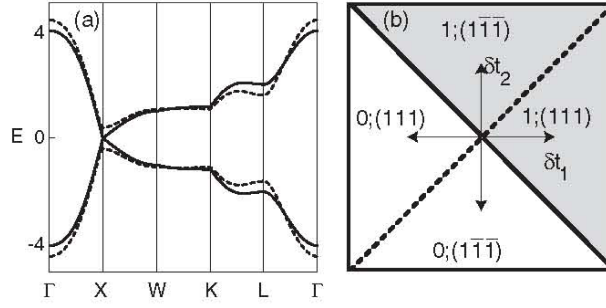


Рис.5

(а) Энергетические уровни для гамильтониана (4). При вычислении были использованы значения $t = 1$, $\lambda_{SO} = 0.125$. Буквами обозначены точки зоны Бриллюэна: $\Gamma = (0, 0, 0)$, $X = (1, 0, 0)$, $W = (1, \frac{1}{2}, 0)$, $K = (\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, 0)$ и $L = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ в единицах $\frac{2\pi}{a}$. (б) Фазовая диаграмма как функция δt_1 и δt_2 (для связей 111 и $1\bar{1}\bar{1}$ соответственно). Закрашена область, соответствующая STI. (Из статьи [1])

Добавим, что гамильтониан вблизи точки X^z гамильтониан можно разложить по $\mathbf{q} = \mathbf{k} - X^z$, и он примет вид 3+1 мерного уравнения Дирака:

$$\mathcal{H}_{eff}^z = t\sigma^y q_z + 4\lambda_{SO}a\sigma^z (s^x q_x - s^y q_y) + m^z \sigma^x.$$

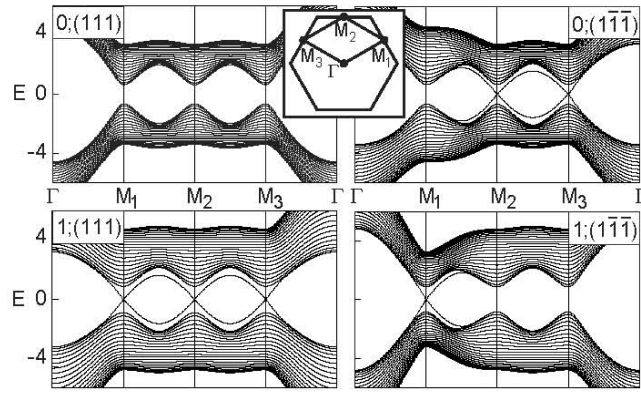


Рис.6

Электронный спектр STI ($M_\nu = \frac{\pi}{2a} (1, 1, 1)$) на решетке алмаза в присутствии пары дислокаций (вторая дислокация добавлена, чтобы при моделировании можно было поставить периодические граничные условия). Из статьи [1]

На рис.6 показаны результаты численного эксперимента для различных фаз. Кроме объемных состояний отчетливо видны состояния, спектр которых пересекает щель. В WTI фазе $0; (111)$ и $0; (\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ есть 0 и 2 2D дираковских узла на верхних и нижних поверхностях. В STI фазе $1; (111)$ и $1; (\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ существуют 1(3) дираковских узла на каждой поверхности. В любом из этих случаев вблизи дираковского узла состояния различаются по направлению спина, т.е. $\langle \mathbf{s}(-\mathbf{k}) \rangle = -\langle \mathbf{s}(\mathbf{k}) \rangle$.

7 Дислокации

Перейдем теперь к рассмотрению топологического изолятора с дислокацией. Дислокация - это линейный дефект трехмерного кристаллического порядка, характеризующийся вектором \mathbf{B} (вектором Бюргерса), который является вектором решетки. Центр дислокации находится на кривой $\mathbf{R}(\sigma)$, где σ параметризует кривую. Удобным методом представления дислокации является процесс Вольтерра. Начнем с идеального кристалла и выберем плоскость P , которая заканчивается вдоль кривой $\mathbf{R}(\sigma)$, вдоль которой и будет образован дефект. Затем сместим кристалл с одной стороны от плоскости P на вектор Бюргерса \mathbf{B} , добавляя или убирая лишние атомы, если требуется. Кристаллическая решетка восстанавливается везде, кроме окрестности кривой $\mathbf{R}(\sigma)$. Дислокацией кручения называется дислокация с касательным вектором $\mathbf{t} = \frac{d\mathbf{R}(\sigma)}{d\sigma} \parallel \mathbf{B}$, в то время как краевой дислокацией - с $\mathbf{t} \perp \mathbf{B}$. В общем случае дислокация изменяется между двумя этими типами вдоль ее длины.

Мы покажем, что для топологического изолятора с инвариантами $(\nu_0; \mathbf{M}_\nu)$ с дислокацией, характеризующейся вектором Бюргерса \mathbf{B} , в случае

$$\mathbf{B} \cdot \mathbf{M}_\nu = \pi(\text{mod } 2\pi) \quad (6)$$

на дислокации локализована пара одномерных состояний, чей спектр пересекает щель объемных состояний. Состояния связаны операцией обращения времени. Обыкновенный изолятор также может нести одномерные состояния, локализованные на дислокации, но пара Крамерса образоваться не может. В статье [3]

было проведено моделирование для TI с решеткой алмаза и уже упомянутым гамильтонианом (1). Его результаты подтверждают условие (2) (см рис.7).

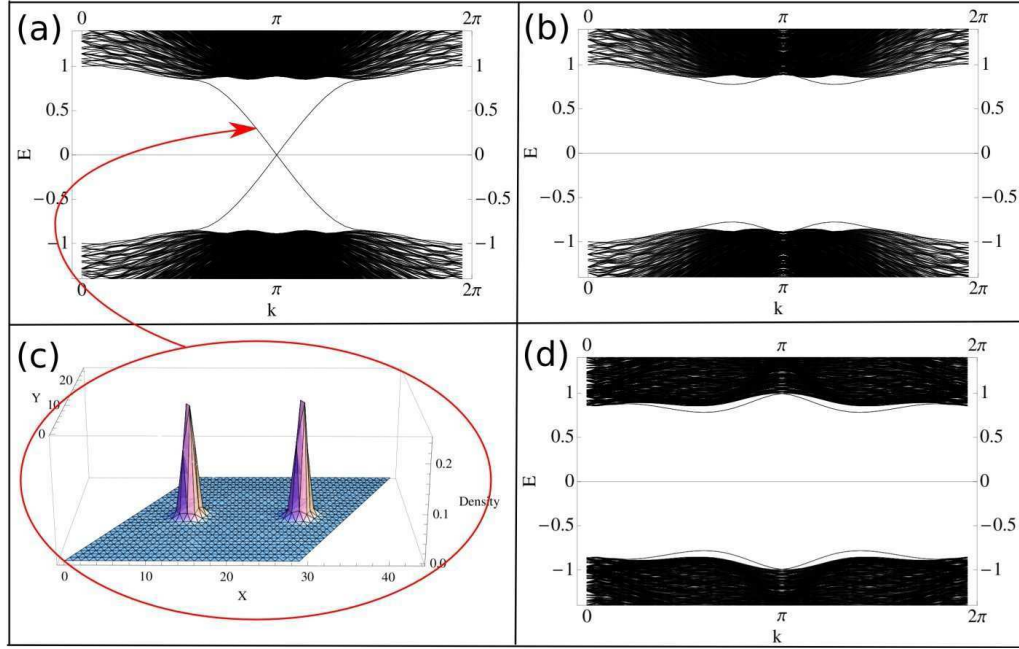


Рис.7

Электронный спектр STI ($\mathbf{M}_\nu = \frac{\pi}{2a}(1, 1, 1)$) на решетке алмаза в присутствии пары дислокаций. Спектр показан как функция квазиимпульса вдоль дислокации. (a) Спектр при $\mathbf{V} = \mathbf{a}_3$ и $\mathbf{V} \cdot \mathbf{M}_\nu = \pi(\text{mod } 2\pi)$. (b) Спектр при $\mathbf{V} = 2\mathbf{a}_3$, $\mathbf{V} \cdot \mathbf{M}_\nu = 0(\text{mod } 2\pi)$. (c) Распределение вероятности для состояний, пересекающих щель. Состояния локализованы вблизи дислокацию (d) $\mathbf{V} = a(0, 1, -1)$, $\mathbf{V} \cdot \mathbf{M}_\nu = 0$.

Перейдем к нахождению состояний, локализованных на дислокации. Мысленно вырежем в топологическом изоляторе цилиндр радиуса R с осью вдоль линии дислокации. Предположим сначала, что топологический изолятор сильный, и дираковский узел в спектре поверхностных состояний один (позднее мы снимем это ограничение). Рассмотрим состояния, локализованные вблизи поверхности цилиндра. Найдем эффективный гамильтониан для таких состояний. Сделаем это согласно способу, предложенному в статье [4]. Начнем с гамильтониана для поверхностных состояний для случая плоской поверхности:

$$H_{flat} = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})$$

Для случая поверхности, обладающей кривизной он видоизменится ([4]):

$$H_{curved} = (\hat{\mathbf{n}}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma})(\hat{\mathbf{n}}_1 \cdot \mathbf{p}) + (\hat{\mathbf{n}}_2 \cdot \boldsymbol{\sigma})(\hat{\mathbf{n}}_2 \cdot \mathbf{p}) + \frac{i}{2R}(\hat{\mathbf{n}}_3 \cdot \boldsymbol{\sigma})$$

Чтобы доказать правильность этого утверждения воспользуемся советом, данным в той же статье [4], и проверим эрмитовость и выполнение антикоммутиационного соотношения $\{H_{curved}, (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}_3)\} = 0$.

Антикоммутиационное соотношение нужно для того, чтобы спин был касателен к поверхности. Следовательно, для любой функции ψ , являющейся собственной функцией гамильтониана должно выполняться $\langle \psi | (\sigma \cdot \hat{\mathbf{n}}_3) | \psi \rangle = 0$. Тогда

$$\begin{aligned} \langle \psi | (\sigma \cdot \hat{\mathbf{n}}_3) H_{curved} | \psi \rangle &= \varepsilon \langle \psi | (\sigma \cdot \hat{\mathbf{n}}_3) | \psi \rangle \text{ (действуя гамильтонианом вправо)} \\ \langle \psi | H_{curved} (\sigma \cdot \hat{\mathbf{n}}_3) | \psi \rangle &= \varepsilon \langle \psi | (\sigma \cdot \hat{\mathbf{n}}_3) | \psi \rangle \text{ (действуя гамильтонианом влево)} \end{aligned}$$

Складывая уравнения:

$$\langle \psi | \{H_{curved}, (\sigma \cdot \hat{\mathbf{n}}_3)\} | \psi \rangle = 2\varepsilon \langle \psi | (\sigma \cdot \hat{\mathbf{n}}_3) | \psi \rangle$$

Если потребовать $\{H_{curved}, (\sigma \cdot \hat{\mathbf{n}}_3)\} = 0$, то для $\varepsilon \neq 0$ должно выполняться

$$\langle \psi | (\sigma \cdot \hat{\mathbf{n}}_3) | \psi \rangle = 0, \text{ что и требуется. В случае } \varepsilon = 0 \text{ условие } \langle \psi | (\sigma \cdot \hat{\mathbf{n}}_3) | \psi \rangle = 0$$

необязательно, но, узловкак будет видно дальше, уровень энергии получается вырожденным, и состояния можно подобрать так, что $\langle \psi_i | (\sigma \cdot \hat{\mathbf{n}}_3) | \psi_i \rangle = 0, i = 1, 2$ (нумерует вырожденные состояния).

Докажем теперь вспомогательные соотношения:

$$\begin{aligned} (\hat{\mathbf{n}}_i \cdot \mathbf{p}) \hat{\mathbf{n}}_j &= \frac{i}{R_i} \delta_{ij} \hat{\mathbf{n}}_i \\ (\hat{\mathbf{n}}_i \cdot \mathbf{p}) \hat{\mathbf{n}}_3 &= -\frac{i}{R_i} \hat{\mathbf{n}}_i \end{aligned}, \text{ где } i, j = 1, 2, R_1 = R, R_2 = \infty.$$

$$(\sigma \cdot \hat{\mathbf{A}}) (\sigma \cdot \hat{\mathbf{B}}) = \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{B}} + i\sigma (\hat{\mathbf{A}} \times \hat{\mathbf{B}})$$

Первые два из них представляют собой просто определения кривизны. Докажем последнее соотношение

$$\sigma_\alpha \hat{\mathbf{A}}_\alpha \sigma_\beta \hat{\mathbf{B}}_\beta = \delta_{\alpha\beta} \hat{\mathbf{A}}_\alpha \hat{\mathbf{B}}_\beta + i e_{\alpha\beta\gamma} \sigma_\gamma \hat{\mathbf{A}}_\alpha \hat{\mathbf{B}}_\beta = \hat{\mathbf{A}}_\alpha \hat{\mathbf{B}}_\alpha + i\sigma_\gamma (\hat{\mathbf{A}} \times \hat{\mathbf{B}})_\gamma = \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{B}} + i\sigma (\hat{\mathbf{A}} \times \hat{\mathbf{B}})$$

Сначала проверим антикоммутиационное соотношение (используем при выкладках полученные соотношения):

$$\begin{aligned} \{(\hat{\mathbf{n}}_1 \cdot \sigma) (\hat{\mathbf{n}}_1 \cdot \mathbf{p}), (\hat{\mathbf{n}}_3 \cdot \sigma)\} &= (\hat{\mathbf{n}}_3 \cdot \sigma) (\hat{\mathbf{n}}_1 \cdot \sigma) (\hat{\mathbf{n}}_1 \cdot p) + (\hat{\mathbf{n}}_1 \cdot \sigma) (\hat{\mathbf{n}}_1 \cdot \mathbf{p}) (\hat{\mathbf{n}}_3 \cdot \sigma) = \\ &= i (\hat{\mathbf{n}}_2 \cdot \sigma) (\hat{\mathbf{n}}_1 \cdot p) + (\hat{\mathbf{n}}_1 \cdot \sigma) (\hat{\mathbf{n}}_3 \cdot \sigma) (\hat{\mathbf{n}}_1 \cdot p) - (\hat{\mathbf{n}}_1 \cdot \sigma) \frac{i}{R} (\hat{\mathbf{n}}_1 \cdot \sigma) = -\frac{i}{R} \end{aligned}$$

$$\{(\hat{\mathbf{n}}_2 \cdot \sigma) (\hat{\mathbf{n}}_2 \cdot \mathbf{p}), (\hat{\mathbf{n}}_3 \cdot \sigma)\} = 0$$

$$\{(\hat{\mathbf{n}}_3 \cdot \sigma), (\hat{\mathbf{n}}_3 \cdot \sigma)\} = 2$$

Собирая все вместе:

$$\{H_{curved}, (\hat{\mathbf{n}}_3 \cdot \sigma)\} = -\frac{i}{R} + 2\frac{i}{2R} = 0$$

Проверим эрмитовость:

$$\begin{aligned} H_{curved}^\dagger &= (\hat{\mathbf{n}}_1 \cdot \mathbf{p}) (\hat{\mathbf{n}}_1 \cdot \sigma) + (\hat{\mathbf{n}}_2 \cdot \mathbf{p}) (\hat{\mathbf{n}}_2 \cdot \sigma) - \frac{i}{2R} (\hat{\mathbf{n}}_3 \cdot \sigma) = \\ &= (\hat{\mathbf{n}}_1 \cdot \sigma) (\hat{\mathbf{n}}_1 \cdot \mathbf{p}) + (\hat{\mathbf{n}}_2 \cdot \sigma) (\hat{\mathbf{n}}_2 \cdot \mathbf{p}) + \frac{i}{R} (\hat{\mathbf{n}}_3 \cdot \sigma) - \frac{i}{2R} (\hat{\mathbf{n}}_3 \cdot \sigma) = \\ &= (\hat{\mathbf{n}}_1 \cdot \sigma) (\hat{\mathbf{n}}_1 \cdot \mathbf{p}) + (\hat{\mathbf{n}}_2 \cdot \sigma) (\hat{\mathbf{n}}_2 \cdot \mathbf{p}) + \frac{i}{2R} (\hat{\mathbf{n}}_3 \cdot \sigma) = H_{curved} \end{aligned}$$

Найдем теперь собственные функции гамильтониана H_{curved} .

$$H_{curved} = (\hat{\mathbf{n}}_z \cdot \sigma) p_z + (\hat{\mathbf{n}}_\varphi \cdot \sigma) p_\phi + \frac{i}{2R} (\hat{\mathbf{n}}_r \cdot \sigma)$$

Сделаем преобразование $\psi = U_z(\phi) \psi' = e^{-i\frac{\sigma_z}{2}\phi} \psi'$. Преобразованный гамильтониан:

$$\begin{aligned} H'_{curved} &= U_z^\dagger(\phi) H_{curved} U_z(\phi) = \sigma_z p_z - U_z^\dagger(\phi) (\hat{\mathbf{n}}_\varphi \cdot \sigma) U_z(\phi) \frac{\sigma_z}{2R} + U_z^\dagger(\phi) (\hat{\mathbf{n}}_\varphi \cdot \sigma) U_z(\phi) p_\phi \\ &\quad + \frac{i}{2R} U_z^\dagger(\phi) (\hat{\mathbf{n}}_r \cdot \sigma) U_z(\phi) = \sigma_z p_z - \sigma_y \sigma_z \frac{1}{2R} + \sigma_y p_\phi + \frac{i}{2R} \sigma_x = \sigma_z p_z + \sigma_y p_\phi \end{aligned}$$

Гамильтониан H'_{curved} диагонализуеться подстановкой узлов

$$\psi' = e^{ikz} e^{i\phi} \chi. \quad (7)$$

Найдем уровни энергии:

$$\det \begin{pmatrix} k - \varepsilon & -i\frac{n}{R} \\ i\frac{n}{R} & -k - \varepsilon \end{pmatrix} = 0$$

$$\varepsilon^2 - k^2 - \frac{n^2}{R^2} = 0$$

$$\varepsilon_n(k) = \pm \sqrt{k^2 + \frac{n^2}{R^2}}$$

Найдем теперь, какому условию должно удовлетворять n (целым оно изначально не предполагалось). Волновая функция

ψ должна быть однозначной при $\phi \rightarrow \phi + 2\pi$.

Для матрицы поворота:

$$U_z(\phi + 2\pi) = e^{-i\frac{\sigma_z}{2}(\phi + 2\pi)} = -U_z(\phi)$$

Если из-за наличия дислокации набегаёт дополнительная фаза π , то функция ψ' должна быть периодической, если нет - антипериодической. Первое требует $n \in \mathbb{Z}$, второе - $n + \frac{1}{2} \in \mathbb{Z}$. Если $n \in \mathbb{Z}$, то при $n = 0$:

$$\varepsilon_0(k) = \pm k$$

Такие моды существуют для цилиндра любого радиуса, который теперь можно уменьшать, не увеличивая энергию на единицу длины состояний с $n = 0$. Уменьшать можно, разумеется, только до масштабов порядка постоянной решетки, на котором вокруг дислокации кристаллическая решетка сильно нарушена.

Выведем теперь условие набега фазы π . В рассуждении, проведенном выше мы рассматривали недеформированную решетку. Это эквивалентно тому, что сделали локальную замену координат $\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{u}(\mathbf{r})$. Выберем точку на одном из берегов плоскости P (смотри выше) и обойдем вокруг дислокации, вернувшись на бесконечно близкую точку на другом берегу. Набежит конечное смещение \mathbf{V} . Таким образом, на разных берегах поверхности P значения \mathbf{r}' различаются на конечную величину \mathbf{V} . Волновую функцию вблизи дираковского узла можно представить в виде $\Psi(x_1, x_2) \sim e^{i\mathbf{K}_D \cdot \mathbf{x}} \psi(x_1, x_2)$, где x_1, x_2 - локальные координаты на поверхности, а $\psi(x_1, x_2)$ меняется медленно на масштабе постоянной решетки. Тогда при обходе вокруг дислокации набегаёт фаза $\mathbf{K}_D \cdot \mathbf{V}$, где \mathbf{K}_D лежит в плоскости P' , проходящей через линию дислокации и вектор Бюргерса. Так как \mathbf{K}_D находится в одном из TRIM, а \mathbf{V} является вектором трансляции (иначе решетка не будет восстанавливаться на больших расстояниях), то $\mathbf{K}_D = \frac{1}{2}(n_1 \mathbf{b}_1 + n_2 \mathbf{b}_2 + n_3 \mathbf{b}_3)$ и $\mathbf{K}_D \cdot \mathbf{V} = 0, \pi \pmod{2\pi}$.

Если дираковский узел не один, то условие $\sum_i \mathbf{K}_D^i \cdot \mathbf{V} = \pi \pmod{2\pi}$, где сумма берется по всем поверхностным дираковским узлам, лежащим в плоскости P' , гарантирует существование хотя бы одной пары бесщелевых одномерных состояний на дислокации. С другой стороны, при $\sum_i \mathbf{K}_D^i \cdot \mathbf{V} = 0 \pmod{2\pi}$ не существует топологически защищенных состояний на дислокации.

Теперь перейдем к результату (6), воспользуемся рассуждениями, изложенными в статье [3].

Без потери общности создадим краевую дислокацию с вектором Бюргерса $\mathbf{V} =$

\mathbf{a}_1 , а плоскостью P' выберем плоскость, натянутую на вектора \mathbf{a}_1 и $\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2$. Теперь надо выяснить четность количества узлов Дирака для поверхности P' , для которых $\mathbf{K}_D \cdot \mathbf{V} = \pi$. Плоскость $P' \perp \mathbf{b}_3$, так как $\mathbf{b}_3 \cdot \mathbf{a}_1 = 0$ и $\mathbf{b}_3 \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2) = 0$. Существуют два TRIM, для которых $\mathbf{K}_D \cdot \mathbf{V} = \pi$. Это $\mathbf{K}_D = \frac{\mathbf{b}_1}{2}$ и $\mathbf{K}_D = \frac{\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2}{2}$. Теперь осталось выяснить четность количества N_{Dirac} дираковских узлов на этих TRIM. Она связана с изменением TRP между этими TRIM: $(-1)^{N_{Dirac}} = (-1)^{N_{cross}} = \delta_{\frac{\mathbf{b}_1}{2}} \delta_{\frac{\mathbf{b}_2}{2}} \delta_{\frac{\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_3}{2}} \delta_{\frac{\mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_3}{2}}$, (N_{cross} - число пересечений уровня Ферми с спектром поверхностных состояний). Это же совпадает с определением инварианта ν_1 . Тогда условие $\sum_i \mathbf{K}_D^i \cdot \mathbf{V} = \pi \pmod{2\pi}$ эквивалентно условию $\nu_1 = 1$, или в независимом от выбора дислокации виде: $\mathbf{V} \cdot \mathbf{M}_\nu = \pi \pmod{2\pi}$, что и есть результат (6).

При создании дислокации, кроме чисто топологического эффекта, заключающегося в дополнительном набеге фазы, возникает еще и деформационный потенциал.

В простейшем случае $U(\mathbf{r}) = A \text{Spr} \epsilon_{ij}$ ([8]), ϵ_{ij} - тензор деформации (здесь используется приближение непрерывной среды, которое справедливо при расстоянии до оси дислокации $\rho \gg a$).

Как известно ([9]), $\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$, где \mathbf{u} - смещение. Из [9], для краевой дислокации:

$$u_x = \frac{B}{2\pi} \left(\arctan \frac{y}{x} + \frac{1}{2(1-\mu)} \frac{xy}{x^2+y^2} \right)$$

$$u_y = -\frac{B}{2\pi} \left(\frac{1-2\mu}{2(1-\mu)} \ln \sqrt{x^2+y^2} + \frac{1}{2(1-\mu)} \frac{x^2}{x^2+y^2} \right)$$

Здесь мы считаем, что дислокация параллельна оси $z \equiv x_3$, вектор Бюргерса $\mathbf{V} \parallel x$, μ - коэффициент Пуассона. Тогда:

$$\epsilon_{11} = \frac{B}{2\pi} \left(-\frac{1}{1+\frac{y^2}{x^2}} \frac{y}{x^2} + \frac{1}{2(1-\mu)} \left(\frac{y}{x^2+y^2} - \frac{2x^2y}{(x^2+y^2)^2} \right) \right) = \frac{B}{2\pi} \left(\frac{2\mu-1}{2(1-\mu)} \frac{y}{x^2+y^2} - \frac{1}{2(1-\mu)} \frac{2x^2y}{(x^2+y^2)^2} \right)$$

$$\epsilon_{22} = -\frac{B}{2\pi} \left(\frac{1-2\mu}{2(1-\mu)} \frac{y}{x^2+y^2} - \frac{1}{2(1-\mu)} \frac{2x^2y}{(x^2+y^2)^2} \right)$$

$$\epsilon_{33} = 0$$

Собирая все вместе:

$$\text{Spr} \epsilon_{ij} = -\frac{B}{2\pi} \frac{1-2\mu}{1-\mu} \frac{y}{x^2+y^2}$$

Откуда:

$$U(\mathbf{r}) = \frac{C}{\rho} \sin \theta \quad (8)$$

где ρ - расстояние до оси дислокации, угол θ отсчитывается от оси, параллельной вектору Бюргерса. Деформационный потенциал определен для $\rho \gg a$. Вблизи дислокации описание в его рамках неприемлемо.

Если учитывать $U(\mathbf{r})$ на больших расстояниях по теории возмущений, то:

$$\langle k_z | U(\mathbf{r}) | k_z \rangle = 0 \quad \text{что происходит вследствие интегрирования по углу } \theta;$$

$$\langle k_z | U(\mathbf{r}) | -k_z \rangle = 0 \quad \text{вследствие ортогональности состояний.}$$

Важно, что $\langle k_z | U(\mathbf{r}) | -k_z \rangle = 0$ даже если деформационный потенциал имеет вид, отличный от (8). Следовательно вырождение уровней при $k_z = 0$ он не снимает. Так что утверждение (6) остается в силе.

Разумеется, приведенный выше вывод существования состояний, локализованных на дислокации, таких что их спектр пересекает щель, не является строгим. Но качественно он дает правильный результат.

Список литературы

- [1] L. Fu, C. L. Kane, and E.J. Mele, Phys. Rev. Lett. 98, 106903 (2007)
- [2] L. Fu, and C. L. Kane, Phys. Rev. B 76, 045302 (2007)
- [3] Y. Ran, Y. Zhang, and A. Vishwanath, arXiv:0810.5121v1 (2008)
- [4] Y. Zhang, Y. Ran, and A. Vishwanath, Phys. Rev. B 79, 245331 (2009)
- [5] C.L. Kane and E.J. Mele, Phys. Rev. Lett. 95, 226801 (2005)
- [6] C.L. Kane and E.J. Mele, Phys. Rev. Lett. 95, 146802 (2005)
- [7] L. Fu and C.L. Kane, Phys. Rev. B 74, 195312 (2006)
- [8] В.Б. Шикин, Ю.В. Шикина, УФН, Т.165, №8, с.887-917
- [9] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, “Теоретическая физика”, Том VII