

Московский физико-технический институт  
(государственный университет)  
Институт теоретической физики им. Л.Д.Ландау РАН

«Косвенное обменное взаимодействие магнитных  
примесей в квантовой яме CdTe/HgTe/CdTe»  
(Дипломная работа бакалавра)

студента 222 группы  
Куриловича П.Д.  
научный руководитель  
д.ф.-м.н. Бурмистров И.С.

Черноголовка 2016

# Оглавление

<b>Оглавление</b>	<b>1</b>
<b>1 Введение</b>	<b>2</b>
1.1 Постановка задачи . . . . .	4
1.2 План . . . . .	4
<b>2 Гамильтониан ВNZ</b>	<b>5</b>
2.1 Гамильтониан Кейна . . . . .	5
2.1.1 Симметрии гамильтониана . . . . .	5
2.1.2 $k \cdot p$ теория . . . . .	6
2.2 Низкоэнергетические 2D состояния . . . . .	8
2.3 Учет несимметричности интерфейса относительно инверсии . . . . .	11
2.3.1 Качественное рассмотрение . . . . .	11
2.3.2 Гамильтониан с учетом несимметрии интерфейсов . . . . .	12
<b>3 Магнитные примеси в модели ВNZ</b>	<b>14</b>
3.1 Обменный Гамильтониан . . . . .	14
3.1.1 Гамильтониан примеси в базисе $E1, H1$ . . . . .	15
<b>4 Косвенное обменное взаимодействие</b>	<b>17</b>
4.1 Поляризационный оператор . . . . .	17
4.2 Предварительные вычисления . . . . .	18
4.2.1 Обезразмеривание . . . . .	18
4.2.2 Обобщенный гамильтониан ВNZ . . . . .	19
4.2.3 Интегрирование по энергии . . . . .	20
4.2.4 Пример упрощения . . . . .	20
4.3 Эффективный Гамильтониан . . . . .	21
4.4 Асимптотическое поведение . . . . .	23
4.4.1 Пример вычисления . . . . .	23
4.4.2 Итоговый результат . . . . .	27
4.5 Анизотропия . . . . .	29
<b>5 Заключение</b>	<b>31</b>
<b>6 Список литературы</b>	<b>33</b>

# Глава 1

## Введение

Теоретическое предсказание [1], [2] и экспериментальное наблюдение [3] квантового спинового эффекта Холла в квантовой яме CdTe/HgTe/CdTe (см. рис 1.1) вызвало значительный интерес к этому двумерному топологическому изолятору [4], [5]. Эффект связан с появлением двух бесщелевых краевых состояний для электронов на границе образца: одно состояние движется влево и одно вправо. Характерной чертой этих состояний является полная связь спина электрона с направлением его движения, из-за чего вдоль края идет нескомпенсированный спиновый ток. Более того, в невзаимодействующем пределе такие электроны не испытывают рассеяния на потенциальных барьерах и поэтому, даже при наличии потенциального беспорядка, края имеют идеальные транспортные свойства. Появление квантового спинового эффекта Холла требует наличия симметрии по отношению к обращению времени. Глобально эта симметрия может нарушаться, например, магнитным полем приложенным поперек квантовой ямы. Локальное возмущение, нарушающее симметрию по отношению к обращению времени, не разрушает эффекта в целом, но, тем не менее, может влиять на транспорт вдоль краев [6], [7].

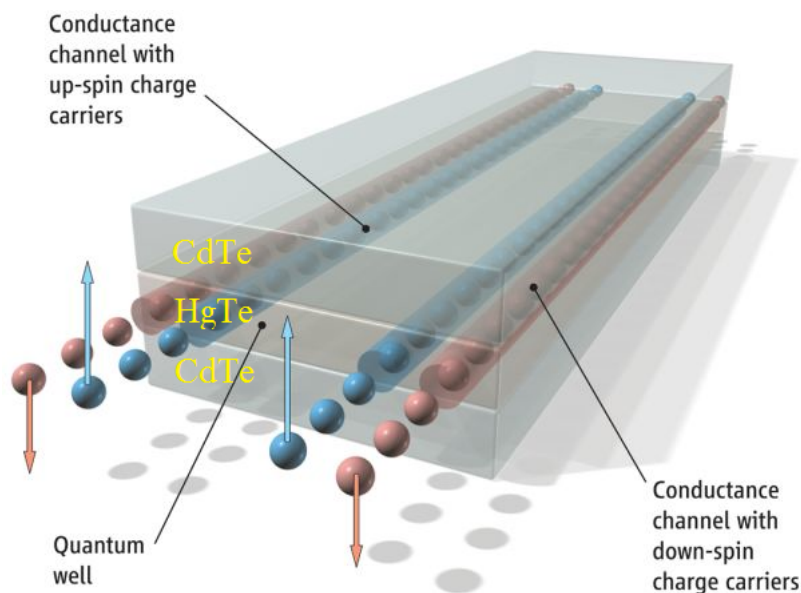


Рис. 1.1: Квантовая яма CdTe/HgTe/CdTe (из [3])

Хорошо известный пример такого локального возмущения, нарушающего симметрию по отношению к обращению времени - магнитные примеси в классическом пределе. Если есть конечная концентрация примесей, то наличие квантового спинового эффекта Холла находится под вопросом. В частности, при ферромагнитном упорядочении спи-

нов магнитных примесей создается сильное направленное обменное поле, и квантовый спиновый эффект Холла подавляется за счет Зеемановского расщепления.

При небольшой концентрации примесей возможная фазовая диаграмма (например, в осях температура/концентрация) определяется косвенным обменным взаимодействием примесей через окружающий их двумерный электронный газ. В случае металлов такое взаимодействие известно как взаимодействие Рудермана-Киттеля-Касуи-Йосиды (RKKY) [8], [9], [10]. Характерная зависимость энергии такого взаимодействия примесей  $A$  и  $B$  от расстояния для трехмерного металла

$$E_{RKKY} \sim \mathbf{S}_A \mathbf{S}_B \frac{2k_F r \cos 2k_F r - \sin 2k_F r}{r^4}$$

где  $k_F$  - фермиевский волновой вектор. В двумерном случае степень взаимодействия по расстоянию меняется, но характер зависимости остается прежним - взаимодействие дальнедействующее и осциллирует с расстоянием. Наличие осцилляций может привести к образованию спин-стеклоподобной фазы при низкой температуре. Недавно большой интерес вызвало RKKY взаимодействие, переносимое поверхностными состояниями в трехмерном топологическом изоляторе [11] - [17]. Было показано, что косвенный обмен может приводить к ферромагнитному упорядочению магнитных примесей около поверхности, тем самым открывая щель в спектре поверхностных состояний. Такой эффект был исследован экспериментально посредством фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением [18] - [20].

Исследования косвенного обменного взаимодействия в полупроводниках были начаты Бломбергенем и Роуландом [21]. Было показано, что при нулевой температуре наличие щели в спектре приводит к экспоненциальному спадаению констант косвенного взаимодействия с расстоянием, при условии, что химический потенциал лежит в щели. Подобное поведение объясняется тем, что для "передачи" проекции спина от примеси к электронам должен произойти переброс электрона через щель, все состояния под ней заполнены и без переброса проекция спина электронной подсистемы остается нулевой и измениться не может. Создание такой электронно-дырочной пары - виртуальный процесс, поэтому существует она лишь конечное время  $\tau \sim \frac{1}{|M|}$ , где  $|M|$  - величина щели. Если  $v$  - характерная величина скорости электронов, то характерное расстояние проходимое виртуальным электроном -  $\frac{v}{|M|}$  и на больших расстояниях должно происходить экспоненциальное подавление взаимодействия.

В простейшем случае спиновая структура косвенного обмена описывается стандартной моделью гейзенбергского ферромагнетика. Абрикосовым в работе [22] было показано, что подобное коротко-действующее ферромагнитное взаимодействие может приводить к образованию спин-стеклоподобной фазы.

Наличие сильного спин-орбитального взаимодействия в полупроводнике усложняет форму косвенного обменного взаимодействия. В частности помимо гейзенбергского ферромагнитного взаимодействия может появиться магнитное псевдо-дипольное взаимодействие, которое подавляет ферромагнитное упорядочение и, тем самым, увеличивает тенденцию к образованию спин-стеклоподобной фазы [23], [24], [25]. Такая ситуация детально изучалась экспериментально в магнитных полупроводниках  $\text{Hg}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$  и  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$  [26].

Стоит также упомянуть еще один результат Абрикосова [22]. Он показал, что при несовпадении минимума спектра зоны проводимости с максимумом спектра валентной зоны,

в экспоненциально затухающем с расстоянием обменном взаимодействии появляется осциллирующий множитель.

## 1.1 Постановка задачи

В данной работе исследуется косвенное обменное взаимодействие между двумя примесями, расположенными на некотором расстоянии друг от друга в толще двумерной квантовой ямы CdTe/HgTe/CdTe. Эффекты, связанные с наличием края, были рассмотрены в работе [27]. Основная вычисляемая величина - низкотемпературный эффективный гамильтониан взаимодействия примесей, т.е. гамильтониан, не содержащий степеней свободы электронной подсистемы. Спектр двумерных электронов движущихся по квантовой яме имеет щель и, в соответствие со сказанным выше, предполагаем, что химический потенциал лежит между дном зоны проводимости и потолком валентной зоны. В работе [28] указывается, что значительное влияние на спектр электронов в квантовой яме оказывает несимметричность квантовой ямы относительно операции  $z \rightarrow -z$ , что может сказаться на косвенном обмене и соответственно должно быть учтено. В частности это приводит к расщеплению состояний по спину и, в соответствии с упомянутым результатом Абрикосова, может привести к осцилляциям в обменной энергии. В ходе решения найдены ответы на следующие вопросы:

- Какова зависимость энергии взаимодействия примесей от расстояния?
- Какова спиновая структура взаимодействия примесей?
- Какое влияние оказывает описанная выше несимметричность квантовой ямы?
- Квантовая яма CdTe/HgTe/CdTe является топологическим изолятором только при толщине прослойки HgTe больше некоторого критического значения  $d_c$ . Есть ли “отголоски” перехода из обычного состояния квантовой ямы в состояние топологического изолятора в косвенном обмене между примесями, расположенными в толще структуры и, поэтому, не взаимодействующими с краевыми состояниями?
- Есть ли анизотропия, связанная с взаимодействием с электронной подсистемой, для уединенной примеси?

## 1.2 План

Работа устроена следующим образом: в главе 2 описывается низкоэнергетическая структура состояний определяющих взаимодействие примесей; в главе 3 выводится вид Гамильтониана магнитной примеси в терминах этих состояний; в конце концов, в главе 4 выводится и анализируется эффективный Гамильтониан взаимодействия примесей, а также анизотропия для уединенной примеси. В главе 5 подводятся итоги работы.

# Глава 2

## Гамильтониан ВНЗ

### 2.1 Гамильтониан Кейна

В этом разделе напомним, как выводится гамильтониан Кейна для электронов в толще HgTe или CdTe, описывающий движение электронов с небольшими волновыми векторами. Основной метод получения такого низкоэнергетического гамильтониана в подобных случаях -  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  теория, основанная на симметриях гамильтониана. Рассмотрим поэтому симметрию кристаллов HgTe и CdTe.

#### 2.1.1 Симметрии гамильтониана

HgTe, как и CdTe имеют кристаллическую структуру типа цинковой обманки. Соответствующая точечная группа -  $T_d$  - группа симметрии тетраэдра, содержит 24 элемента разбитых на пять классов эквивалентности, т.е. в рассматриваемой группе есть пять неприводимых представлений. При наличии спин-орбитального взаимодействия необходимо формально ввести в группу новый элемент - вращение на  $2\pi$ , т.к. спиновая волновая функция электрона при таком вращении не переходит в себя. Полученная группа называется двойной группой  $T_d$ . Можно получить следующие соотношения:

$$C_n^n = O, \quad C_n^{2n} = E, \quad \sigma^2 = O, \quad I^2 = E$$

Здесь  $C_n$  обозначает вращение вокруг некоторой оси на угол  $2\pi/n$ ,  $E$  - тождественный элемент,  $I$  - инверсия,  $\sigma$  - отражение в плоскости,  $O$  - вращение на  $2\pi$  (см., например, [29], [30]). В двойной группе есть 8 классов эквивалентности, т.е. появляются 3 новых неприводимых представления - 2D  $\Gamma_6, \Gamma_7$  и 4D  $\Gamma_8$ . При волновом векторе  $\mathbf{k} = 0$  состояния каждой ветви спектра преобразуются по одному из этих трех представлений (первые пять представлений становятся нефизичны, т.к. соответствующая волновая функция не меняется при повороте на  $2\pi$ ).

Пусть ось  $z$  направлена вдоль  $[001]$  в кристалле, ось  $x$  вдоль  $[100]$ , ось  $y$  вдоль  $[010]$ . Тогда ортонормированные базисные функции этих представлений устроены следующим образом (см., например, [31]):

$$\Gamma_6 : \begin{cases} |s \uparrow\rangle \\ |s \downarrow\rangle \end{cases} \quad (2.1)$$

$$\Gamma_7 : \begin{cases} |\frac{1}{\sqrt{3}}[-(x - iy) \uparrow + z \downarrow]\rangle \\ |\frac{1}{\sqrt{3}}[-(x + iy) \downarrow - z \uparrow]\rangle \end{cases} \quad (2.2)$$

$$\Gamma_8 : \begin{cases} |\frac{-1}{\sqrt{2}}(x + iy) \uparrow \\ |\frac{1}{\sqrt{6}}[-(x + iy) \downarrow + 2z \uparrow] \\ |\frac{1}{\sqrt{6}}[(x - iy) \uparrow + 2z \downarrow] \\ |\frac{1}{\sqrt{2}}(x - iy) \downarrow \end{cases} \quad (2.3)$$

Под  $|s\rangle$  понимается инвариантная по отношению к операциям  $T_d$  волновая функция, а под  $|x\rangle$ ,  $|y\rangle$  и  $|z\rangle$  понимаются преобразующиеся, как соответствующие компоненты вектора  $\mathbf{r}$ , волновые функции. В особенности важны для нас будут представления  $\Gamma_6$  и  $\Gamma_8$ . Если рассматривать только вращательные элементы группы симметрии, то можно увидеть, что эти представления дополняются до представлений группы вращений:  $\Gamma_6 \rightarrow D_{1/2}$ ,  $\Gamma_8 \rightarrow D_{3/2}$ . Таким образом эти представления можно характеризовать "угловым моментом" в том смысле, что соответствующие волновые функции преобразуются под действием вращений из  $T_d$  также как и состояния с заданным угловым моментом:

$$\Gamma_6 : \begin{cases} |1/2, +1/2\rangle = |s \uparrow \\ |1/2, -1/2\rangle = |s \downarrow \end{cases} \quad (2.4)$$

$$\Gamma_8 : \begin{cases} |3/2, +3/2\rangle = |\frac{-1}{\sqrt{2}}(x + iy) \uparrow \\ |3/2, +1/2\rangle = |\frac{1}{\sqrt{6}}[-(x + iy) \downarrow + 2z \uparrow] \\ |3/2, -1/2\rangle = |\frac{1}{\sqrt{6}}[(x - iy) \uparrow + 2z \downarrow] \\ |3/2, -3/2\rangle = |\frac{1}{\sqrt{2}}(x - iy) \downarrow \end{cases} \quad (2.5)$$

Используя эти факты, можно выписать симметричный низкоэнергетический гамильтониан для случая близкорасположенных ветвей  $\Gamma_6$  и  $\Gamma_8$  (а такой случай и реализуется в HgTe и CdTe [32]), учитывая все прочие ветви по теории возмущений. Соответственно перейдем к применению процедуры  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  теории (для более исчерпывающего обзора см. [33]).

## 2.1.2 $k \cdot p$ теория

Начнем с нахождения спектра вблизи точки  $\mathbf{k} = 0$  ( $\Gamma$ -точки). Предполагается также наличие внешней информации - считаем известными энергии  $E_n$  и волновые функции  $\Psi_n$  в  $\Gamma$ -точке всех ветвей гамильтониана. Оказывается, что функции  $\phi_{n\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{V}}\Psi_n e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$  образуют базис (базис Латтинжера-Кона) в пространстве состояний с заданным  $\mathbf{k}$ . Микроскопический гамильтониан электронов в кристалле ( $\hbar = 1$ )

$$H_{mic} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + \frac{1}{4m^2c^2} [\nabla V \times \mathbf{p}] \cdot \boldsymbol{\sigma}$$

в терминах базиса Латтинжера-Кона записывается как:

$$H_{n'n}(\mathbf{k}) = \left( E_n + \frac{k^2}{2m} \right) \delta_{n'n} + \frac{1}{m} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi}_{n'n} \quad (2.6)$$

Где  $n$  пробегает по всем ветвям спектра,  $\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} + \frac{1}{4mc^2} [\boldsymbol{\sigma}, \nabla V]$ , а матричные элементы вычислены между блоховскими волновыми функциями на нулевом  $\mathbf{k}$ . Далее, однако, мы будем пренебрегать отличием между  $\boldsymbol{\pi}$  и  $\mathbf{p}$ , считая, что весь учет спин орбитального взаимодействия заложен в структуру  $E_n$  и  $\Psi_n$ . Теперь, делая малый поворот базиса приходим к матричному гамильтониану  $6 \times 6$  ( $\Gamma_6 - 2D$ ,  $\Gamma_8 - 4D$ ):

$$\tilde{H}_{m'm}(\mathbf{k}) = \left( E_m + \frac{k^2}{2m} \right) \delta_{m'm} + \frac{1}{m} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{m'm} + \frac{1}{2m^2} \sum_l p_{m'l}^i p_{lm}^j k^i k^j \left( \frac{1}{E_{m'} - E_l} + \frac{1}{E_m - E_l} \right) \quad (2.7)$$

Элементы  $m$  соответствуют ветвям  $\Gamma_6$  и  $\Gamma_8$ , а  $l$  - всем прочим ветвям.

Большое число матричных элементов импульса зануляются по симметричным соображениям. В частности  $\mathbf{p}$  преобразуется в соответствии с векторным представлением (его называют  $\Gamma_4$ ). Тогда матричный элемент вида  $\langle \Gamma_i | \mathbf{p} | \Gamma_j \rangle$  может быть отличен от нуля только если  $\Gamma_i \times \Gamma_4 \times \Gamma_j$  содержит единичное представление ([33]). Значительная часть элементов равна нулю в силу нечетности относительно, например, поворота на  $\pi$  вокруг оси  $z$ . Более того, легко понять, что среди ненулевых матричных элементов есть очень малое число независимых - почти всегда матричные элементы импульса сводятся друг к другу с помощью групповых операций  $T_d$ . Используя подобные соображения можно прийти к следующему гамильтониану, который называется гамильтонианом Кейна (см. [33]):

$$\tilde{H}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} E_g + \frac{k^2}{2m^*} & 0 & \frac{-1}{\sqrt{2}}Pk_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z & \frac{1}{\sqrt{6}}Pk_- & 0 \\ 0 & E_g + \frac{k^2}{2m^*} & 0 & \frac{-1}{\sqrt{6}}Pk_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z & \frac{1}{\sqrt{2}}Pk_- \\ \frac{-1}{\sqrt{2}}Pk_- & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z & \frac{-1}{\sqrt{6}}Pk_- & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{1}{\sqrt{6}}Pk_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z & \dots & \dots & H_v(\mathbf{k}) & \dots \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}Pk_+ & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

Здесь  $k_+ = k_x + ik_y$ ,  $k_- = k_+^*$ ,  $P = -\frac{1}{m} \langle s | p_x | x \rangle$ , а  $H_v(\mathbf{k})$  называется гамильтонианом Латтинжера валентной зоны:

$$H_v(\mathbf{k}) = \left( E_v + \frac{k^2}{2m} \right) I + \frac{\hbar^2}{m^2} \begin{pmatrix} \Pi_1(\mathbf{k}) & \Lambda_1(\mathbf{k}) & \Lambda_2(\mathbf{k}) & 0 \\ \Lambda_1^*(\mathbf{k}) & \Pi_2(\mathbf{k}) & 0 & \Lambda_2(\mathbf{k}) \\ \Lambda_2^*(\mathbf{k}) & 0 & \Pi_2(\mathbf{k}) & -\Lambda_1(\mathbf{k}) \\ 0 & \Lambda_2^*(\mathbf{k}) & -\Lambda_1^*(\mathbf{k}) & \Pi_1(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

где

$$\Lambda_1(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{3}}(A + R)k_z k_-$$

$$\Lambda_2(\mathbf{k}) = \frac{-1}{\sqrt{12}}(k_-^2 A + Rk_+^2)$$

$$\Pi_1(\mathbf{k}) = \frac{1}{2}Ak_+k_- + \frac{1}{3}Qk^2 + \left( \frac{2}{3}k_z^2 + \frac{1}{6}k_+k_- \right) R$$

$$\Pi_2(\mathbf{k}) = \frac{1}{2}Rk_+k_- + \frac{1}{3}Qk^2 + \left( \frac{2}{3}k_z^2 + \frac{1}{6}k_+k_- \right) A$$

$A$ ,  $R$  и  $Q$  определяются через междузонные матричные элементы импульса следующим образом:

$$A = \sum_{\Gamma_6} \frac{|\langle x | p_x | s \rangle|^2}{E_v - E_{\Gamma_6}}$$

$$R = \sum_{\Gamma_7} \frac{|\langle x | p_y | z' \rangle|^2}{E_v - E_{\Gamma_7}}$$

$$Q = \sum_{\Gamma_8} \frac{|\langle x | p_y | z \rangle|^2}{E_v - E_{\Gamma_8}}$$

Стоит отметить, что вторым порядком в междузонных элементах можно пренебречь по сравнению со вторым порядком во внутризонных элементах (дополнительная малость



появится из того, что ветви  $\Gamma_6$  и  $\Gamma_8$ , на которые был сужен гамильтониан, слабо связаны).

Спектр трехмерных кристаллов HgTe и CdTe изображен на рисунке 2.1. Важно от-

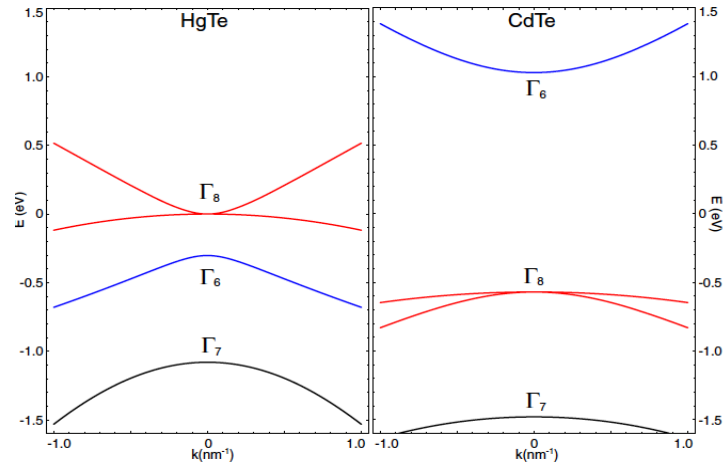


Рис. 2.1: Спектр HgTe и CdTe (из [2])

метить, что в HgTe ветвь с симметрией  $\Gamma_8$  расположена над ветвью с симметрией  $\Gamma_6$  в то время как в CdTe ветви расположены наоборот.

## 2.2 Низкоэнергетические 2D состояния

Экспериментально квантовая яма CdTe/HgTe/CdTe впервые была реализована и промерена Моленкампом и сотрудниками [3]. Квантовая яма была направлена вдоль оси [001] кристалла. Вид их экспериментальной установки приведен на рисунке 2.2. Видно, что в действительности квантовая яма реализуется в несколько более сложном варианте, однако мы отвлечемся от этих нюансов. Авторы работы также наблюдали краевые состояния - о их наличии свидетельствует идеальное квантованное сопротивление.

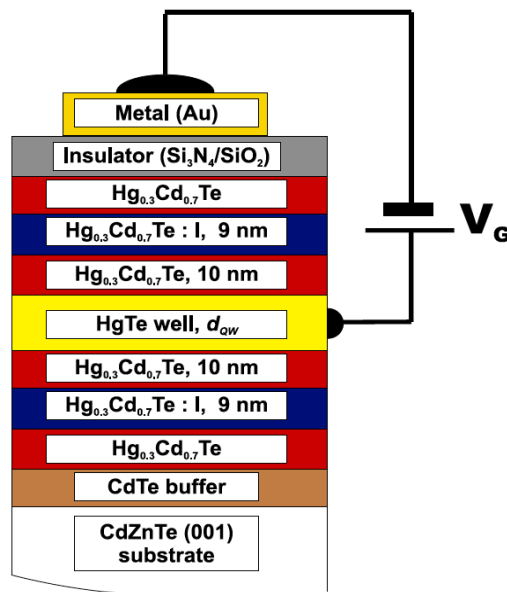


Рис. 2.2: Квантовая яма CdTe/HgTe/CdTe (из [3])

Теоретически квантовая яма CdTe/HgTe/CdTe с  $z \parallel [001]$ ,  $x \parallel [100]$ ,  $y \parallel [010]$  была рассмотрена в статье [2] на основе гамильтониана Кейна. С помощью численного счета авторы получили значения констант  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  теории:  $P$ ,  $Q$ ,  $R$ ,  $A$  в HgTe и в CdTe. Из-за отсутствия трансляционной инвариантности вдоль направления  $z$ , в стационарном уравнении Шредингера с гамильтонианом 2.8,  $k_z$  формально заменяется на  $-i\partial_z$ . Подобный подход дает множество решений, которые обозначают как  $|E1, \pm\rangle$  (электронная ветка),  $|H1, \pm\rangle$  (дырочная ветка),  $|H2, \pm\rangle$ ,  $|H3, \pm\rangle$  и так далее. Отличительной особенностью является то, что при достижении некоторой критической толщины прослойки из HgTe ( $\approx 6.3$  nm) происходит *инверсия зон*: при докритической толщине состояния  $|E1, \pm\rangle$  (положительная дисперсия) расположены по энергии выше состояний  $|H1, \pm\rangle$  (отрицательная дисперсия), при надкритической толщине  $|H1, \pm\rangle$  (положительная дисперсия) расположены над состояниями  $|E1, \pm\rangle$  (отрицательная дисперсия). Более того, когда толщина близка к критической, состояния  $E1$  и  $H1$  изолированы от всех прочих состояний (см. 2.3). В дальнейшем будет рассматриваться именно такой случай, а также будет предполагаться, что химический потенциал расположен в щели между состояниями  $E1$  и  $H1$  - в частности в такой конфигурации наблюдаются краевые состояния. Анализ гамильтониана Кейна [2] показывает, что в терминах близких состояний  $\Gamma_6$  и

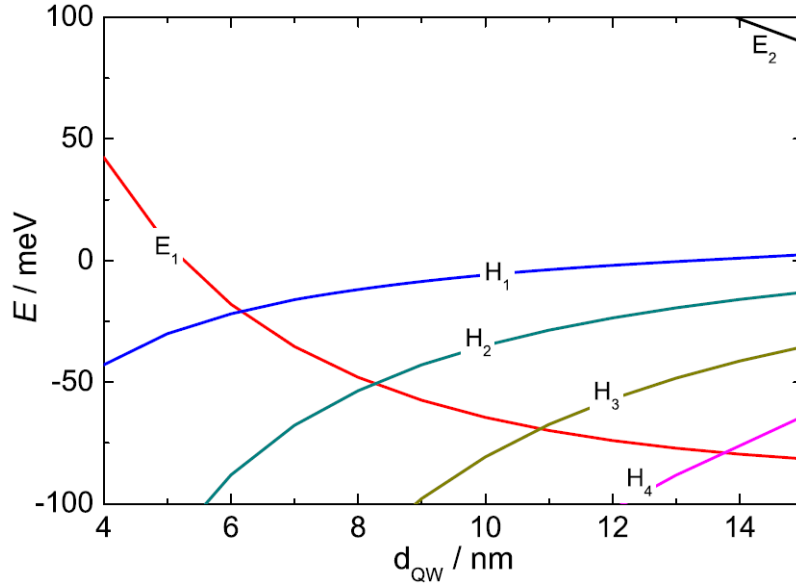


Рис. 2.3: Ветви спектра и инверсия зон (из [2])

$\Gamma_8$  двумерные состояния в квантовой яме выписываются как:

$$\begin{cases} |E1, +\rangle = f_1(z)|1/2, +1/2\rangle + f_4|3/2, +1/2\rangle \\ |E1, -\rangle = f_2(z)|1/2, -1/2\rangle + f_5|3/2, -1/2\rangle \\ |H1, +\rangle = f_3(z)|3/2, +3/2\rangle \\ |H1, -\rangle = f_6(z)|3/2, -3/2\rangle \end{cases} \quad (2.10)$$

При этом функции  $z$  обладают рядом симметричных свойств:  $f_1, f_2, f_3, f_6$  - четные,  $f_4, f_5$  - нечетные. Все функции спадают экспоненциально при удалении от квантовой ямы. Также стоит учесть, что гамильтониан Кейна обладает симметрией по отношению к обращению времени. Это приводит ([34]) к дополнительным соотношениям. Если  $\mathcal{T}$  -

это оператор обращения времени:

$$\begin{cases} \mathcal{T}|E1, +\rangle = |E1, -\rangle \\ \mathcal{T}|H1, +\rangle = |H1, -\rangle \\ \mathcal{T}|E1, -\rangle = -|E1, +\rangle \\ \mathcal{T}|H1, -\rangle = -|H1, +\rangle \end{cases} \quad (2.11)$$

И, соответственно, для огибающих функций  $f$ :

$$\begin{cases} f_1 = f_2^* \\ f_3 = f_6^* \\ f_4 = -f_5^* \end{cases} \quad (2.12)$$

Вообще можно считать, что  $f_1, f_3$  - действительны, а  $f_4$  - мнимая.

Теперь перейдем непосредственно к рассмотрению двумерного гамильтониана описывающего рассматриваемые состояния на малых волновых векторах - этот гамильтониан называется гамильтонианом Берневига-Хьюза-Жанга (ВНЗ) и был впервые предложен в работе [2]. Для его получения достаточно применить теорию возмущений к гамильтониану Кейна по состояниям  $H1, E1$ . Полученный Гамильтониан имеет следующую форму:

$$H_{\text{ВНЗ}}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} h(\mathbf{k}) & 0_{2 \times 2} \\ 0_{2 \times 2} & h^*(-\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

Здесь

$$h(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k})I_{2 \times 2} + \begin{pmatrix} M(\mathbf{k}) & Ak_+ \\ Ak_- & -M(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

и

$$\epsilon(\mathbf{k}) = C - Dk^2 \quad M(\mathbf{k}) = M - Bk^2 \quad (2.15)$$

Спектр двумерных электронов в модели ВНЗ двукратно вырожден и имеет следующий вид:

$$\varepsilon_{1,3}(\mathbf{k}) = -Dk^2 + \text{sgn}M\sqrt{A^2k^2 + (M - Bk^2)^2} \quad (2.16)$$

$$\varepsilon_{2,4}(\mathbf{k}) = -Dk^2 - \text{sgn}M\sqrt{A^2k^2 + (M - Bk^2)^2} \quad (2.17)$$

Примечательно, что при  $B = D = 0$  спектр переходит в спектр графена с щелью. Численный расчет параметров гамильтониана ВНЗ приводит к значениям, перечисленным в таблице 2.1. Смена знака щели  $M$  (как и  $\text{sgn}M$  в спектре) при прохождении  $d = 6.3$  nm отвечает уже упомянутой инверсии зон. Вид спектра для толщин ямы из таблицы 2.1 представлен на рисунке 2.4.

Таблица 2.1: Параметры гамильтониана ВНЗ

$d$ , nm	$A$ , eV·nm	$B$ , eV·nm <sup>2</sup>	$D$ , eV·nm <sup>2</sup>	$M$ , eV
5.5	0.39	-0.48	-0.31	0.009
7.0	0.36	-0.69	-0.51	-0.008

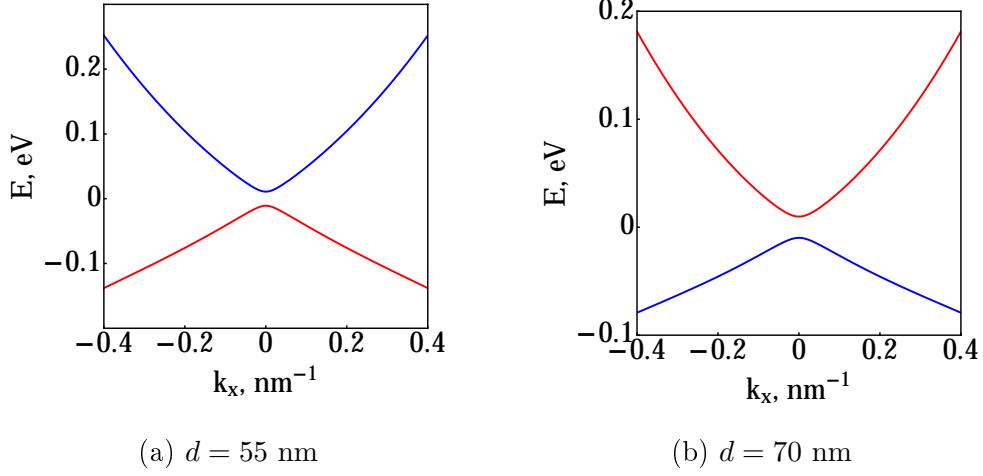


Рис. 2.4: Спектр гамильтониана BHZ

Важно отметить, что гамильтониан BHZ обладает вращательной инвариантностью (относительно групповых операций) в плоскости:

$$RH_{\text{BHZ}}R^{-1} = H_{\text{BHZ}}, \quad R = \begin{pmatrix} e^{\frac{i\Omega}{2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{\frac{3i\Omega}{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\frac{i\Omega}{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-\frac{3i\Omega}{2}} \end{pmatrix}$$

Еще раз обратим внимание на то, что ветви в модели BHZ - двукратно вырожденные. Измерения эффекта Шубникова-де-Гааза и слабой локализации [35], однако указывают на наличие расщепления ветвей спектра в квантовой яме. Хотя в работе [35] рассматривалась яма [113] подобное расщепление может иметь место и в нашем случае. Как было показано в работе [28], вычисление гамильтониана для квантовой ямы в статье [2], изложенное выше полностью пропускает эффекты, связанные с отсутствием инверсионной симметрии кристалла и инверсионной симметрии интерфейсов гетероструктуры. Учет этих эффектов приводит к появлению в гамильтониане слагаемых, наличие которых не запрещено групповыми свойствами с учетом понижения симметрии. В следующем разделе будет проведено более подробное рассмотрение этого расщепления.

## 2.3 Учет несимметричности интерфейса относительно инверсии

### 2.3.1 Качественное рассмотрение

В первую очередь рассмотрим качественно возникновение ассиметрии интерфейса, как оказывается, этот эффект намного значительнее отсутствия центра инверсии в кристалле [28]. Будем смотреть на кристалл вдоль оси  $z$  ([001]) и рассмотрим последовательно оба интерфейса. В верхнем (вдоль  $z$ ) интерфейсе два последовательных слоя Te и Cd имеют выделенное направление, причем, как оказывается, оно перпендикулярно выделенному направлению последовательных Cd и Te на нижнем интерфейсе. Это изображено на рисунке 2.5.

Таким образом интерфейс не обладает симметрией относительно инверсии ямы  $z \rightarrow -z$ . Более того видно, что учет ассиметрии интерфейсов приводит к потере вращательной

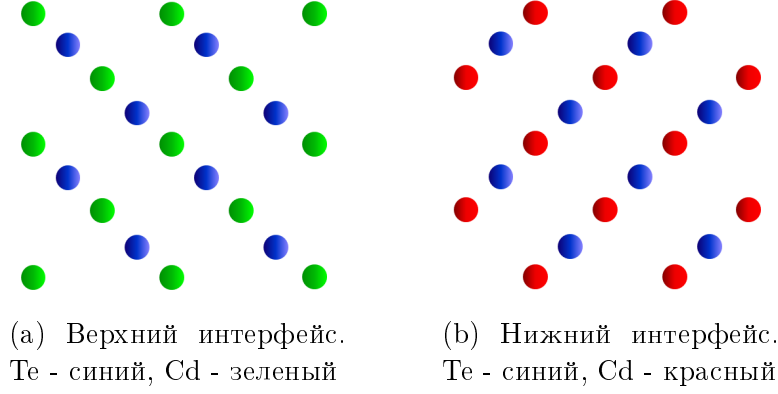


Рис. 2.5: Последовательные два атомных слоя на интерфейсах, вид с оси  $z$

инвариантности в задаче (опять же в смысле элементов группы  $T_d$ ), однако сохраняется инвариантность относительно поворотов на  $\pi$ .

### 2.3.2 Гамильтониан с учетом несимметрии интерфейсов

Как было показано в работе [28] на основе атомистических расчетов, в рамках уже выписанных состояний  $E1$  и  $H1$  единственной модификацией, которую надо внести в гамильтониан ВНЗ, чтобы учесть несимметричность интерфейсов, является добавление оффдиагональных элементов:

$$H = H_{\text{ВНЗ}} + H_{\text{SIA}}, \quad H_{\text{SIA}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \Delta \\ 0 & 0 & -\Delta & 0 \\ 0 & -\Delta & 0 & 0 \\ \Delta & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

Приведенное качественное рассмотрение согласованно с такой поправкой: гамильтониан теряет вращательную симметрию в плоскости, но тем не менее при повороте на  $\pi$  переходит в себя:

$$RH_{\text{SIA}}R^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \Delta e^{2i\Omega} \\ 0 & 0 & -\Delta e^{2i\Omega} & 0 \\ 0 & -\Delta e^{-2i\Omega} & 0 & 0 \\ \Delta e^{-2i\Omega} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad R = \begin{pmatrix} e^{\frac{i\Omega}{2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{\frac{3i\Omega}{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\frac{i\Omega}{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-\frac{3i\Omega}{2}} \end{pmatrix}$$

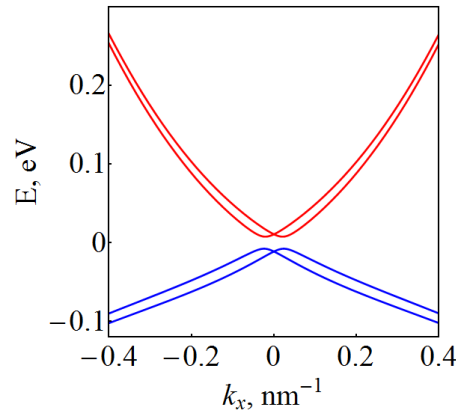


Рис. 2.6: Спектр в модели ВНЗ при конечном  $\Delta$

В простейшей модели можно считать, что  $\Delta$  не зависит от волнового вектора, но в принципе возможно считать  $\Delta = \Delta(k^2)$ . Очень важным результатом работы [28] является то, что  $\Delta$  оказывается по порядку величины совпадающим с щелью в спектре  $M$  - численные вычисления дают значение  $\Delta \approx 7$  eV.

Спектр с учетом  $\Delta$  приобретает следующий вид:

$$\varepsilon_{1,3}(\mathbf{k}) = -Dk^2 + \text{sgn}M \sqrt{(Ak \pm \Delta)^2 + (M - Bk^2)^2} \quad (2.19)$$

$$\varepsilon_{2,4}(\mathbf{k}) = -Dk^2 - \text{sgn}M \sqrt{(Ak \pm \Delta)^2 + (M - Bk^2)^2} \quad (2.20)$$

Характерный вид спектра для  $M > 0$  изображен на рисунке 2.6. В нем явно видно расщепление ветвей.

Перейдем теперь к рассмотрению магнитных примесей в квантовой яме CdTe/HgTe/CdTe.

# Глава 3

## Магнитные примеси в модели ВНЗ

В этой главе рассматриваются магнитные примеси в квантовой яме CdTe/HgTe/CdTe. Под магнитными примесями можно понимать встроенные в решетку атомы марганца, хотя возможны и другие их реализации.

### 3.1 Обменный Гамильтониан

Будем считать, что обменное взаимодействие электрона с примесью не зависит явно от ветви, к которой принадлежит электрон и изотропно (далее это предположение будет снято). Таким образом, микроскопически гамильтониан взаимодействия выписывается как:

$$V = J(\mathbf{r})\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (3.1)$$

Здесь  $S$  - спин примеси. Функция  $J(\mathbf{r})$  будет обсуждена позже. Далее будет использоваться обозначение  $J\mathbf{S} \rightarrow \mathbf{B}$ . Понятно, что примесь разрушает трансляционную инвариантность и  $k$  больше не является хорошим квантовым числом, поэтому дальше будет использоваться приближение эффективной массы (см. [33]). Разложим решение уравнения Шредингера по блоховским функциям с  $\mathbf{k} = 0$ :

$$\Psi = \sum_n F_n(\mathbf{r})\Psi_n(\mathbf{r}) \quad (3.2)$$

Функции  $F_n$  называются огибающими функциями. Предполагается, что на атомарных масштабах они варьируются достаточно медленно. В Фурье-пространстве:

$$F_n(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} C_{n\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (3.3)$$

Таким образом совершен переход к базису Латтинжера-Кона  $\phi_{n\mathbf{k}}$ :

$$\Psi = \sum_{n\mathbf{k}} C_{n\mathbf{k}} \phi_{n\mathbf{k}} \quad (3.4)$$

В итоге получаем гамильтониан магнитной примеси, действующий в пространстве столбцов коэффициентов  $c_{n\mathbf{k}}$ :

$$V_{n'\mathbf{k}',n\mathbf{k}} = \int \phi_{n'\mathbf{k}'}^+(\mathbf{r}) \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}) \phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \quad (3.5)$$

Далее раскладываем  $\mathbf{B}$  по Фурье-гармоникам:

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{B}_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \quad (3.6)$$

Более того, ясно, что  $\Psi_{n'}^+ \sigma \Psi_n$  периодична, поэтому ее можно разложить по векторам обратной решетки (обозначаем их как  $\mathbf{b}_M$ ):

$$\Psi_{n'}^+ \sigma \Psi_n = \sum_M \sigma_{n'n}^M e^{i\mathbf{b}_M \mathbf{r}} \quad (3.7)$$

Последние преобразования определены без  $\sqrt{V}$  и его надо учитывать в обратном преобразовании. В конце концов, переписываем примесное слагаемое как:

$$\sum_M \sigma_{n'n}^M \mathbf{B}_{\mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{b}_M} \quad (3.8)$$

Далее предполагаем, что  $\mathbf{B}(\mathbf{r})$  медленно меняется на атомных масштабах. Это предположение является ключевым для построения гамильтониана примеси. В таком случае можно пренебречь всеми  $M$ , кроме  $M = 0$ . В итоге, после всех упрощений:

$$V_{n'\mathbf{k}', n\mathbf{k}} = \sigma_{n'n} \mathbf{B}_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}} \quad (3.9)$$

Далее опять сужаем гамильтониан на  $\Gamma_6$  и  $\Gamma_8$ , учитывая, что междузонные матричные элементы матриц Паули, а тогда и второй порядок теории возмущений по волновому вектору, зануляются. Далее переходим назад в координатное представление.

Матричные элементы  $\sigma \cdot \mathbf{S}$ :

$$\sigma_{m'm} \cdot \mathbf{S} = \begin{pmatrix} 2\mathbf{J}_{1/2} \cdot \mathbf{S} & \hat{0} \\ \hat{0} & \frac{2}{3}\mathbf{J}_{3/2} \cdot \mathbf{S} \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

Здесь  $\mathbf{J}_j$  матрицы момента  $j$ . В итоге гамильтониан взаимодействия электронов с примесью

$$V_{6 \times 6} = J(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} 2\mathbf{J}_{1/2} \cdot \mathbf{S} & \hat{0} \\ \hat{0} & \frac{2}{3}\mathbf{J}_{3/2} \cdot \mathbf{S} \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

Мы будем рассматривать примеси, контактно взаимодействующие с электронами:  $J(\mathbf{r}) = \alpha \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$  (примесь расположена в точке  $\mathbf{r}_0$ ). При этом надо помнить, что контактным взаимодействием может быть лишь в смысле огибающих функций электронов, "ширина" такого взаимодействия тем не менее много больше атомных масштабов.

Можно обобщить эту модель для случая разного спаривания с ветвями  $\Gamma_6$  и  $\Gamma_8$ :

$$V_{6 \times 6} = \delta(\mathbf{r}^{(3D)} - \mathbf{r}_0^{(3D)}) \begin{pmatrix} 2\alpha_{1/2} \mathbf{J}_{1/2} \cdot \mathbf{S} & \hat{0} \\ \hat{0} & \frac{2}{3} \alpha_{3/2} \mathbf{J}_{3/2} \cdot \mathbf{S} \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

### 3.1.1 Гамильтониан примеси в базисе E1, H1

Теперь рассмотрим примесь как возмущение к гамильтониану ВNZ. В первом порядке по константе связи (дельта функция вне интеграла - двумерная):

$$V_{4 \times 4}^{ij} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \int dz \delta(z - z_0) \langle i | \begin{pmatrix} 2\alpha_{1/2} \mathbf{J}_{1/2} \cdot \mathbf{S} & \hat{0} \\ \hat{0} & \frac{2}{3} \alpha_{3/2} \mathbf{J}_{3/2} \cdot \mathbf{S} \end{pmatrix} | j \rangle$$

$|i\rangle$  и  $|j\rangle$  из набора  $|E1, \pm\rangle, |H1, \pm\rangle$ . После проецирования (здесь и далее опускаем индекс  $4 \times 4$ ):

$$V = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \mathcal{V} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \begin{pmatrix} J_1 S_z & -iJ_0 S_+ & J_{mix} S_- & 0 \\ iJ_0 S_- & J_2 S_z & 0 & 0 \\ J_{mix} S_+ & 0 & -J_1 S_z & -iJ_0 S_- \\ 0 & 0 & iJ_0 S_+ & -J_2 S_z \end{pmatrix} \quad (3.13)$$



Где введены обозначения  $\alpha_{1/2}f_1^2 + \frac{1}{3}\alpha_{3/2}|f_4|^2 = J_1$ ,  $\alpha_{3/2}f_3^2 = J_2$ ,  $\frac{1}{\sqrt{3}}\alpha_{3/2}f_3|f_4| = J_0$  и  $\alpha_{1/2}f_1^2 + \frac{2}{3}\alpha_{3/2}|f_4|^2 = J_{mix}$ . Отсюда можно получить:  $J_{mix} = J_1 + J_0^2/J_2$ . В частном случае  $z_0 = 0$ :  $J_{mix} = J_1$ ,  $J_0 = 0$ , т.к.  $f_4$  нечетная функция  $z$ .

Такой вид гамильтониана (без констант) можно было угадать с самого начала, заметив, что полный угловой момент сохраняется в процессе временной эволюции. Также стоит отметить, что такой вид верен и для случая конечного  $\Delta$ .

# Глава 4

## Косвенное обменное взаимодействие

### 4.1 Поляризационный оператор

Перейдем непосредственно к вычислению косвенного обменного взаимодействия. Как упоминалось мы считаем, что химический потенциал  $\mu$  расположен в щели между состояниями  $E1$  и  $H1$ . Будем также полагать  $T = 0$ . Все изложенные далее вычисления остаются верны и при конечной температуре пока выполнено условие  $|M| - |\mu| \gg T$ .

Итак, рассматриваются две примеси:  $A$  и  $B$ , расположенные в  $\mathbf{r}_A$  и  $\mathbf{r}_B$  соответственно. Обозначим вектор  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B$ . Необходимо получить выражение для эффективного гамильтониана примесей  $H_{\text{eff}}$  (т.е. гамильтониана в котором произведено интегрирование по электронной подсистеме и по которому можно вычислять все средние от функций только спинов примесей), как функцию  $\mathbf{r}$ ,  $\mathbf{S}_A$ ,  $\mathbf{S}_B$ . Легко убедиться, что эффективный гамильтониан формально совпадает с поправкой к термодинамическому потенциалу для задачи с классическими примесями  $\Delta\Omega$ . В таком случае ясно, что вычисления удобнее всего проводить в Мацубаровской температурной технике, заменяя при этом все суммирование по мацубаровским частотам на интегрирование.

Многочастичный гамильтониан взаимодействия электронов с примесями имеет вид

$$\mathcal{H}_{imp} = \int d^3\mathbf{r}' \psi_\alpha^+(\mathbf{r}') (\mathcal{V}_A^{\alpha\beta} \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_A) + \mathcal{V}_B^{\alpha\beta} \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_B)) \psi_\beta(\mathbf{r}') = \int d^3\mathbf{r}' \psi_\alpha^+(\mathbf{r}') \mathcal{V}^{\alpha\beta}(\mathbf{r}') \psi_\beta(\mathbf{r}') \quad (4.1)$$

Операторы  $\psi$  и  $\psi^+$  обозначают соответственно операторы уничтожения и рождения электронов в данной точке (естественно, в смысле медленных огибающих функций). Далее используем известное выражение для термодинамического потенциала:

$$\Delta\Omega = -T \left( \left\langle U \left( \frac{1}{T} \right) \right\rangle_c - 1 \right) \quad (4.2)$$

$$U(\tau) = T_\tau \exp \left( - \int_0^\tau d\tau' \mathcal{H}_{imp}(\tau') \right) \quad (4.3)$$

где, как всегда,

$$\mathcal{H}_{imp}(\tau) = e^{\tau(\mathcal{H}_0 - \mu N)} \mathcal{H}_{imp} e^{-\tau(\mathcal{H}_0 - \mu N)}$$

и  $\langle \rangle_c$  обозначает суммирование по всем связным диаграммам.

Член первого порядка в разложении зануляется. Это следует из того, что без учета примесей в основном состоянии электронная подсистема не намагничена. Во втором порядке получается исчезающий ответ, даваемый диаграммой типа "поляризационный оператор" (см. рис. 4.1).

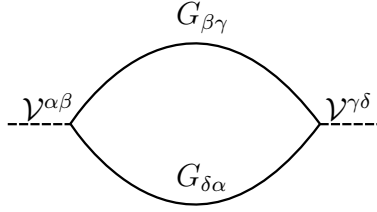


Рис. 4.1: Поляризационный оператор

В поляризационном операторе есть 3 слагаемых: между-примесное, определяющее взаимодействие и два слагаемых, задающих анизотропию для каждой примеси. О последних двух слагаемых речь пойдет позднее в секции 4.5, сперва сфокусируемся на вычислении междупримесного вклада  $H_{\text{IEI}}$ . Явное выражение через функции Грина:

$$H_{\text{IEI}} = \nu_A^{\alpha\beta} \nu_B^{\gamma\delta} \Pi_{\beta\gamma, \delta\alpha}$$

$$\Pi_{\beta\gamma, \delta\alpha} = T \sum_{\omega_n} G_{\beta\gamma}(i\omega_n, \mathbf{r}) G_{\delta\alpha}(i\omega_n, -\mathbf{r}) \quad (4.4)$$

Здесь  $\omega_n = \pi T(2n + 1)$  - фермионные мадубаровские частоты. В соответствии со сказанным выше, рассматриваем нуль-температурный предел:

$$\Pi_{\beta\gamma, \delta\alpha} = \int \frac{d\omega}{2\pi} G_{\beta\gamma}(i\omega, \mathbf{r}) G_{\delta\alpha}(i\omega, -\mathbf{r}) \quad (4.5)$$

Для вычисления удобно перейти в фурье-представление, тогда получаем

$$\Pi_{\beta\gamma, \delta\alpha} = \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{d^2 k_1}{(2\pi)^2} \frac{d^2 k_2}{(2\pi)^2} e^{i\mathbf{r}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)} \left( \frac{1}{i\omega + \mu - H(\mathbf{k}_1)} \right)_{\beta\gamma} \left( \frac{1}{i\omega + \mu - H(\mathbf{k}_2)} \right)_{\delta\alpha} \quad (4.6)$$

Понятно, что ответ не зависит от положения химического потенциала внутри щели, поэтому для удобства положим  $\mu = 0$ . Таким образом задача свелась к вычислению интеграла 4.6, которое приведено далее.

## 4.2 Предварительные вычисления

### 4.2.1 Обезразмеривание

Перед тем, как начать вычисление следует произвести удобное обезразмеривание. Сперва введем характерные масштабы длины ( $a$ ) и энергии ( $\mathcal{E}$ ):

$$a = \sqrt{B^2 - D^2}/A, \quad \mathcal{E} = A^2/\sqrt{B^2 - D^2}. \quad (4.7)$$

Далее вводим:

$$m = \frac{M}{\mathcal{E}}, \quad \cosh \chi = -\frac{B}{\sqrt{B^2 - D^2}}, \quad \gamma = \frac{\Delta}{|m|\mathcal{E}}. \quad (4.8)$$

Используя таблицу 1 из [4] и значение  $\Delta \approx 7 \text{ meV}$  [28] можно оценить введенные параметры (см. таблицу 4.1). Стоит отметить, что безразмерный параметр  $|m| \ll 1$ ,  $\chi \sim 1$ . В конце концов, введем безразмерные переменные  $\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{k}a/|m|$  и  $\boldsymbol{\rho} = \mathbf{r}|m|/a$ . В терминах этих параметров гамильтониан ВNZ выписывается как

$$\mathcal{H} = \frac{H}{|M|} = -|m| \sinh \chi \kappa^2 + \begin{pmatrix} \mathcal{M}(\kappa^2) & \kappa_+ & 0 & \gamma \\ \kappa_- & -\mathcal{M}(\kappa^2) & -\gamma & 0 \\ 0 & -\gamma & \mathcal{M}(\kappa^2) & -\kappa_- \\ \gamma & 0 & -\kappa_+ & -\mathcal{M}(\kappa^2) \end{pmatrix} \quad (4.9)$$

Таблица 4.1: Параметры гамильтониана

$d$ , nm	$a$ , nm	$\mathcal{E}$ , eV	$m$	$\gamma$	$\chi$
5.5	0.94	0.42	0.022	0.78	-0.77
7.0	1.29	0.28	-0.029	0.87	-0.95

Где

$$\mathcal{M}(\boldsymbol{\kappa}) = \text{sgn}M(1 + m \cosh \chi \kappa^2)$$

Безразмерный спектр (связанный с обычным как  $\varepsilon = |M|\epsilon$ ) имеет вид

$$\epsilon_{1,3}(\boldsymbol{\kappa}) = -|m| \sinh \chi \kappa^2 + \text{sgn}M \sqrt{(\kappa \pm \gamma)^2 + (1 + m \cosh \chi \kappa^2)^2} \quad (4.10)$$

$$\epsilon_{2,4}(\boldsymbol{\kappa}) = -|m| \sinh \chi \kappa^2 - \text{sgn}M \sqrt{(\kappa \pm \gamma)^2 + (1 + m \cosh \chi \kappa^2)^2} \quad (4.11)$$

### 4.2.2 Обобщенный гамильтониан ВНЗ

Теперь можно несколько обобщить постановку задачи и вместо гамильтониана ВНЗ можно рассмотреть гамильтониан:

$$H = -D(k^2) + \begin{pmatrix} M(k^2) & A(k^2)k_+ & 0 & \Delta(k^2) \\ A(k^2)k_- & -M(k^2) & -\Delta(k^2) & 0 \\ 0 & -\Delta(k^2) & M(k^2) & -A(k^2)k_- \\ \Delta(k^2) & 0 & -A(k^2)k_+ & -M(k^2) \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

Где

$$D(k^2) = Dk^2 + \tilde{D}k^4 + \dots \quad M(k^2) = M - Bk^2 + \tilde{B}k^4 + \dots \quad A(k^2) = A + \tilde{A}k^2 + \dots$$

$$\Delta(k^2) = \Delta + \tilde{\Delta}k^2 + \dots$$

Строгий критерий правильности вывода для такого гамильтониана общего вида будет сформулирован ниже по ходу изложения. Стоит однако сразу отметить, что необходимым условием является "похожесть" на гамильтониан ВНЗ: по крайней мере ветви  $E1$  и  $H1$  должны быть направлены в разные стороны. Обезразмеривание проводим точно также как и для обычного гамильтониана ВНЗ. В итоге рассматриваем безразмерный гамильтониан вида

$$\mathcal{H} = \frac{H}{|M|} = -\mathcal{D}(\kappa^2) + \begin{pmatrix} \mathcal{M}(\kappa^2) & \mathcal{A}(\kappa^2)\kappa_+ & 0 & \gamma(\kappa^2) \\ \mathcal{A}(\kappa^2)\kappa_- & -\mathcal{M}(\kappa^2) & -\gamma(\kappa^2) & 0 \\ 0 & -\gamma(\kappa^2) & \mathcal{M}(\kappa^2) & -\mathcal{A}(\kappa^2)\kappa_- \\ \gamma(\kappa^2) & 0 & -\mathcal{A}(\kappa^2)\kappa_+ & -\mathcal{M}(\kappa^2) \end{pmatrix} \quad (4.13)$$

Безразмерный спектр

$$\epsilon_{1,3}(\boldsymbol{\kappa}) = -\mathcal{D}(\kappa^2) + \text{sgn}M \sqrt{(\mathcal{A}(\kappa^2) \pm \gamma)^2 + \mathcal{M}^2(\kappa^2)} = -\mathcal{D}(\kappa^2) + \text{sgn}M \vartheta_{\pm} \quad (4.14)$$

$$\epsilon_{2,4}(\boldsymbol{\kappa}) = -\mathcal{D}(\kappa^2) - \text{sgn}M \sqrt{(\mathcal{A}(\kappa^2) \pm \gamma)^2 + \mathcal{M}^2(\kappa^2)} = -\mathcal{D}(\kappa^2) - \text{sgn}M \vartheta_{\pm} \quad (4.15)$$

В терминах обезразмеренного Гамильтониана выражение для поляризационного оператора выписывается как

$$\Pi_{\beta\gamma,\delta\alpha} = \frac{|M|^3}{A^4} \int \frac{dv}{2\pi} \frac{d^2\kappa_1}{(2\pi)^2} \frac{d^2\kappa_2}{(2\pi)^2} e^{i\rho(\boldsymbol{\kappa}_1 - \boldsymbol{\kappa}_2)} \left( \frac{1}{iv - \mathcal{H}(\boldsymbol{\kappa}_1)} \right)_{\beta\gamma} \left( \frac{1}{iv - \mathcal{H}(\boldsymbol{\kappa}_2)} \right)_{\delta\alpha} \quad (4.16)$$

Перейдем непосредственно к вычислению этого интеграла.

### 4.2.3 Интегрирование по энергии

Основная идея на первом этапе вычисления состоит в локальной диагонализации функции Грина. Вводим  $\mathcal{R}(\boldsymbol{\kappa})$ :

$$\mathcal{H}(\boldsymbol{\kappa}) = \mathcal{R}(\boldsymbol{\kappa}) \begin{pmatrix} \epsilon_1(\boldsymbol{\kappa}) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_2(\boldsymbol{\kappa}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_3(\boldsymbol{\kappa}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \epsilon_4(\boldsymbol{\kappa}) \end{pmatrix} \mathcal{R}^{-1}(\boldsymbol{\kappa}) \quad (4.17)$$

Тогда 4.16 сводится к

$$\Pi_{\beta\gamma,\delta\alpha} = \frac{|M|^3}{A^4} \sum_{x,y} \int \frac{dv}{2\pi} \frac{d^2\kappa_1}{(2\pi)^2} \frac{d^2\kappa_2}{(2\pi)^2} e^{i\rho(\kappa_1 - \kappa_2)} \frac{\mathcal{R}_{\beta x}(\boldsymbol{\kappa}_1) \mathcal{R}_{x\gamma}^{-1}(\boldsymbol{\kappa}_1) \mathcal{R}_{\delta y}(\boldsymbol{\kappa}_2) \mathcal{R}_{y\alpha}^{-1}(\boldsymbol{\kappa}_2)}{(iv - \epsilon_x(\boldsymbol{\kappa}_1))(iv - \epsilon_y(\boldsymbol{\kappa}_2))} \quad (4.18)$$

Интеграл по частоте берется вычетами. Ясно тогда, что суммирование переходит в суммирование по ближайшим соседям (с периодом 4) - иначе полюсы лежат по одну сторону от оси интегрирования. Замыкая контур на отрицательный полюс и, после этого, в части слагаемых делая замену  $\boldsymbol{\kappa}_1 \rightarrow -\boldsymbol{\kappa}_2$ ,  $\boldsymbol{\kappa}_2 \rightarrow -\boldsymbol{\kappa}_1$ , оставляющую инвариантной экспоненту, приходим к

$$\begin{aligned} \Pi_{\beta\gamma,\delta\alpha} = & -\frac{|M|^3}{A^4} \sum_{j=1,3} \sum_{l=2,4} \int \frac{d^2\kappa_1}{(2\pi)^2} \frac{d^2\kappa_2}{(2\pi)^2} e^{i\rho(\kappa_1 - \kappa_2)} \frac{1}{\text{sgn}M(\epsilon_j(\boldsymbol{\kappa}_1) - \epsilon_l(\boldsymbol{\kappa}_2))} \times \\ & \times (\mathcal{R}_{\beta j}(\boldsymbol{\kappa}_1) \mathcal{R}_{j\gamma}^{-1}(\boldsymbol{\kappa}_1) \mathcal{R}_{\delta l}(\boldsymbol{\kappa}_2) \mathcal{R}_{l\alpha}^{-1}(\boldsymbol{\kappa}_2) + \mathcal{R}_{\beta l}(-\boldsymbol{\kappa}_2) \mathcal{R}_{l\gamma}^{-1}(-\boldsymbol{\kappa}_2) \mathcal{R}_{\delta j}(-\boldsymbol{\kappa}_1) \mathcal{R}_{j\alpha}^{-1}(-\boldsymbol{\kappa}_1)) \end{aligned} \quad (4.19)$$

Далее отделяем интегрирование по  $\boldsymbol{\kappa}_1$  от интегрирования по  $\boldsymbol{\kappa}_2$  поднимая знаменатель в экспоненту:

$$\begin{aligned} \Pi_{\beta\gamma,\delta\alpha} = & -\frac{|M|^3}{A^4} \int_0^\infty dt \int \frac{d^2\kappa_1}{(2\pi)^2} \frac{d^2\kappa_2}{(2\pi)^2} e^{i\rho(\kappa_1 - \kappa_2)} e^{t\text{sgn}M(\mathcal{D}(\kappa_1^2) - \mathcal{D}(\kappa_2^2))} \times \\ & \times ((\mathcal{R}_{\beta 1} \mathcal{R}_{1\gamma}^{-1} e^{-t\vartheta^+} + \mathcal{R}_{\beta 3} \mathcal{R}_{3\gamma}^{-1} e^{-t\vartheta^-})_{\boldsymbol{\kappa}_1} (\mathcal{R}_{\delta 2} \mathcal{R}_{2\alpha}^{-1} e^{-t\vartheta^+} + \mathcal{R}_{\delta 4} \mathcal{R}_{4\alpha}^{-1} e^{-t\vartheta^-})_{\boldsymbol{\kappa}_2} + \\ & + (\mathcal{R}_{\delta 1} \mathcal{R}_{1\alpha}^{-1} e^{-t\vartheta^+} + \mathcal{R}_{\delta 3} \mathcal{R}_{3\alpha}^{-1} e^{-t\vartheta^-})_{-\boldsymbol{\kappa}_1} (\mathcal{R}_{\beta 2} \mathcal{R}_{2\gamma}^{-1} e^{-t\vartheta^+} + \mathcal{R}_{\beta 4} \mathcal{R}_{4\gamma}^{-1} e^{-t\vartheta^-})_{-\boldsymbol{\kappa}_2}) \end{aligned} \quad (4.20)$$

Видим, таким образом, что в обоих слагаемых интегрирования по  $\boldsymbol{\kappa}_1$  и по  $\boldsymbol{\kappa}_2$  расщепляются.

Обратимся теперь к явному виду матрицы  $\mathcal{R}$ . Несложное вычисление дает:

$$\mathcal{R} = \begin{pmatrix} \frac{M_{++}}{\gamma+\kappa} & \frac{M_{-+}}{\gamma+\kappa} & \frac{M_{+-}}{\gamma-\kappa} & \frac{M_{--}}{\gamma-\kappa} \\ e^{-i\theta} & e^{-i\theta} & -e^{-i\theta} & -e^{-i\theta} \\ \frac{-e^{-i\theta} M_{++}}{\gamma+\kappa} & \frac{-e^{-i\theta} M_{-+}}{\gamma+\kappa} & \frac{e^{-i\theta} M_{+-}}{\gamma-\kappa} & \frac{e^{-i\theta} M_{--}}{\gamma-\kappa} \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.21)$$

Где

$$M_{\pm\pm}(\boldsymbol{\kappa}) = M(\boldsymbol{\kappa}) \pm \text{sgn}M\vartheta_{\pm}(\boldsymbol{\kappa})$$

Осталось подставить это выражение в формулу 4.20 и провести вычисление.

### 4.2.4 Пример упрощения

Чтобы была понятна общая схема вычисления, рассмотрим конкретный пример. Упростим следующий интеграл:

$$\int \frac{d^2\kappa}{(2\pi)^2} e^{i\rho\kappa} e^{t\text{sgn}M\mathcal{D}(\kappa^2)} (\mathcal{R}_{11} \mathcal{R}_{11}^{-1} e^{-t\vartheta^+} + \mathcal{R}_{13} \mathcal{R}_{31}^{-1} e^{-t\vartheta^-})_{\boldsymbol{\kappa}} \quad (4.22)$$

Подставляя  $\mathcal{R}$  получаем

$$\int \frac{d^2\kappa}{(2\pi)^2} e^{i\rho\kappa} e^{t\text{sgn}M\mathcal{D}(\kappa^2)} \left( \frac{\vartheta_+ + \text{sgn}M\mathcal{M}}{4\vartheta_+(\kappa)} e^{-t\vartheta_+(\kappa)} + \frac{\vartheta_- + \text{sgn}M\mathcal{M}}{4\vartheta_-(\kappa)} e^{-t\vartheta_-(\kappa)} \right) \quad (4.23)$$

Интегрируя по углам и учитывая, что спектр от угла не зависит:

$$\int_0^\infty \frac{\kappa d\kappa}{8\pi} J_0(\rho\kappa) e^{t\text{sgn}M\mathcal{D}(\kappa^2)} \left( \frac{\vartheta_+ + \text{sgn}M\mathcal{M}}{\vartheta_+} e^{-t\vartheta_+} + \frac{\vartheta_- + \text{sgn}M\mathcal{M}}{\vartheta_-} e^{-t\vartheta_-} \right) \quad (4.24)$$

Легко увидеть, что при  $\kappa \rightarrow -\kappa$  (именно в терминах модуля)  $\vartheta_+ \rightarrow \vartheta_-$ . С учетом этого переписываем выражение как

$$\frac{1}{8\pi} \int_{-\infty}^\infty d\kappa \frac{|\kappa|}{\vartheta_-} J_0(\rho\kappa) e^{t\text{sgn}M\mathcal{D}(\kappa^2)} (\vartheta_- + \text{sgn}M\mathcal{M}) e^{-t\vartheta_-} \quad (4.25)$$

Это и есть конечная форма выражения, с которой удобно работать в дальнейшем.

### 4.3 Эффективный Гамильтониан

Теперь все готово, чтобы получить эффективный гамильтониан взаимодействия примесей  $H_{\text{IEI}}$ .

Введем следующие обозначения:

$$L_\nu^\pm = \int d\kappa \frac{|\kappa|}{\vartheta_-} e^{-t\vartheta_-} e^{\text{sgn}M\mathcal{D}(\kappa^2)} J_\nu(\kappa\rho) (\vartheta_- \pm \text{sgn}M\mathcal{M}) \quad (4.26)$$

$$P_\nu^\pm = \int d\kappa \frac{|\kappa|}{\vartheta_-} e^{-t\vartheta_-} e^{-\text{sgn}M\mathcal{D}(\kappa^2)} J_\nu(\kappa\rho) (\vartheta_- \pm \text{sgn}M\mathcal{M}) \quad (4.27)$$

$$L_\nu = \int d\kappa \frac{|\kappa|}{\vartheta_-} e^{-t\vartheta_-} e^{\text{sgn}M\mathcal{D}(\kappa^2)} J_\nu(\kappa\rho) (\gamma - \kappa) \quad (4.28)$$

$$P_\nu = \int d\kappa \frac{|\kappa|}{\vartheta_-} e^{-t\vartheta_-} e^{-\text{sgn}M\mathcal{D}(\kappa^2)} J_\nu(\kappa\rho) (\gamma - \kappa) \quad (4.29)$$

Тогда, проводя длительное, но принципиально простое вычисление, подобное приведенному в разделе 4.2.4 и используя общую формулу для связи поляризационного оператора с эффективным гамильтонианом взаимодействия примесей  $H_{\text{IEI}} = \mathcal{V}_{\alpha\beta}^A \mathcal{V}_{\gamma\delta}^B \Pi_{\beta\gamma,\delta\alpha}$  получаем:

$$H_{\text{IEI}} = \frac{|M|^3}{A^4 16\pi^2} \int_0^\infty dt S_i^A S_j^B U_{ij}(R, t) \quad (4.30)$$

Где

$$U_{zz} = - \left( (J_2^A J_1^B + J_1^A J_2^B) (P_0 L_0 - P_1 L_1) + J_2^A J_2^B (L_0^- P_0^+ - L_1^- P_1^+) + J_1^A J_1^B (P_0^- L_0^+ - P_1^- L_1^+) \right)$$

$$\begin{aligned} U_{xx} &= J_0^A J_0^B (2P_0 L_0 + 2P_1 L_1 - P_0^- L_0^- - P_0^+ L_0^+ - P_1^- L_1^- - P_1^+ L_1^+) - \\ &- J_0^A J_0^B 2(P_1 L_1 - P_1^- L_1^- - P_1^+ L_1^+) n_x^2 - J_{mix}^A J_{mix}^B (P_0^- L_0^+ + P_1^- L_1^+ (n_x^2 - n_y^2)) - \\ &- 2 \text{sgn}M (L_1 P_1^- - P_1 L_1^+) (J_{mix}^A J_0^B + J_0^A J_{mix}^B) n_x n_y \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} U_{xy} &= -2J_0^A J_0^B (2P_1 L_1 - P_1^- L_1^- - P_1^+ L_1^+) n_x n_y + 2J_{mix}^A J_{mix}^B P_1^- L_1^+ n_x n_y + \\ &+ \text{sgn}M (J_{mix}^A J_0^B + J_0^A J_{mix}^B) (L_0 P_0^- - P_0 L_0^+) + \text{sgn}M (L_1 P_1^- - P_1 L_1^+) (J_{mix}^A J_0^B - J_0^A J_{mix}^B) (n_x^2 - n_y^2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} U_{xz} &= \text{sgn}M J_0^A (J_1^B (P_0^- L_1 + P_1^- L_0 - P_1 L_0^+ - P_0 L_1^+) + J_2^B (P_1 L_0^- + P_0 L_1^- - P_0^+ L_1 - P_1^+ L_0)) n_x - \\ &- J_{mix}^A (J_2^B (P_1 L_0 + P_0 L_1) + J_1^B (P_1^- L_0^+ + P_0^- L_1^+)) n_y \end{aligned}$$

При этом, как нетрудно убедиться, остальные слагаемые непосредственно получаются из перечисленных выше. В частности  $U_{yy}$ ,  $U_{yx}$ ,  $U_{yz}$  получаются из  $U_{xx}$ ,  $U_{xy}$ ,  $U_{xz}$  заменой  $n_x$  на  $n_y$  и  $n_y$  на  $n_x$ .  $U_{zx}$  и  $U_{zy}$  равны соответственно  $-U_{xz}$  и  $-U_{yz}$ , если в последних еще поменять местами индексы примесей  $A$  и  $B$ .

Важно отметить, что знак перед некоторыми слагаемыми напрямую зависит от топологической фазы топологического изолятора - этому соответствует  $\text{sgn}M$ , встречающийся в формулах выше. Также отметим, что помимо стандартных слагаемых Гейзенбергского типа есть множество других слагаемых, имеющих нетривиальную угловую зависимость.

Таким образом, в общем виде выяснена спиновая структура ответа для взаимодействия примесей, и задача о нахождении координатной зависимости обменного гамильтониана сведена к вычислению интегралов. Как уже упоминалось в разделе 2.3.2, наличие неравного нулю  $\gamma$  значительно понижает симметрию в плоскости, однако гамильтониан переходит в себя при повороте плоскости на угол  $\pi$ , а тогда и взаимодействие примесей инвариантно относительно таких вращений. В последнем факте действительно можно убедиться непосредственно проделав небольшое вычисление. Посмотрим как упрощается ответ в случае  $\gamma = 0$ . Легко видеть, что подынтегральные функции в формулах 4.26 - 4.29 становятся более симметричными и поэтому:

$$L_1^\pm = P_1^\pm = L_0 = P_0 = 0 \quad (4.31)$$

Тогда

$$\begin{aligned} U_{zz} &= (J_2^A J_1^B + J_1^A J_2^B) P_1 L_1 - J_2^A J_2^B L_0^- P_0^+ - J_1^A J_1^B P_0^- L_0^+ \\ U_{xx} &= J_0^A J_0^B (2P_1 L_1 - P_0^- L_0^- - P_0^+ L_0^+) - 4J_0^A J_0^B P_1 L_1 n_x^2 - J_{mix}^A J_{mix}^B P_0^- L_0^+ \\ U_{xy} &= -4J_0^A J_0^B P_1 L_1 n_x n_y \\ U_{xz} &= \text{sgn}M J_0^A (J_1^B (P_0^- L_1 - P_1 L_0^+) + J_2^B (P_1 L_0^- - P_0^+ L_1)) n_x \end{aligned} \quad (4.32)$$

и получаем следующий ответ:

$$\begin{aligned} H_{\text{IEI}} &= \frac{|M|^3}{A^4 16\pi^2} \int_0^\infty dt ((\mathbf{S}_\parallel^A \cdot \mathbf{n}) S_z^B \text{sgn}M J_0^A (J_1^B (P_0^- L_1 - P_1 L_0^+) + J_2^B (P_1 L_0^- - P_0^+ L_1)) - \\ &\quad - (\mathbf{S}_\parallel^B \cdot \mathbf{n}) S_z^A \text{sgn}M J_0^B (J_1^A (P_0^- L_1 - P_1 L_0^+) + J_2^A (P_1 L_0^- - P_0^+ L_1)) + \\ &\quad + (\mathbf{S}_\parallel^A \cdot \mathbf{S}_\parallel^B) (J_0^A J_0^B (2P_1 L_1 - P_0^- L_0^- - P_0^+ L_0^+) - J_{mix}^A J_{mix}^B P_0^- L_0^+) - 4J_0^A J_0^B P_1 L_1 (\mathbf{S}_\parallel^A \cdot \mathbf{n}) (\mathbf{S}_\parallel^B \cdot \mathbf{n}) + \\ &\quad + S_z^A S_z^B ((J_2^A J_1^B + J_1^A J_2^B) P_1 L_1 - J_2^A J_2^B L_0^- P_0^+ - J_1^A J_1^B P_0^- L_0^+)) \end{aligned} \quad (4.33)$$

Стоит отметить, что этот ответ обладает полной вращательной инвариантностью - в записи через скалярные произведения это сразу видно.

Если две одинаковые примеси расположены на одной высоте, то все  $J^A$  и  $J^B$  равны (т.к.  $J$  выражаются лишь через огибающие функции  $f_i$  2.10) и первые два слагаемых под интегралом 4.3 комбинируются к виду

$$\sim [\mathbf{n} \times [\mathbf{S}^A \times \mathbf{S}^B]]_z \quad (4.34)$$

Такое взаимодействие примесей называется взаимодействием Дзялошинского-Мори. Пусть теперь одинаковые примеси расположены в самом центре (по  $z$ ) квантовой ямы. С учетом результатов раздела 3.1.1  $J_1 = J_{mix}$ ,  $J_0 = 0$ . Тогда получаем совсем простой

ответ:

$$H_{\text{IEI}} = \frac{|M|^3}{A^4 16\pi^2} \int_0^\infty dt (S_z^A S_z^B ((J_2^A J_1^B + J_1^A J_2^B) P_1 L_1 - J_2^A J_2^B L_0^- P_0^+) - J_1^A J_1^B P_0^- L_0^+ \mathbf{S}^A \mathbf{S}^B) \quad (4.35)$$

Однако такое рассмотрение на этом этапе не позволяет выяснить зависимость констант межспинового взаимодействия от расстояния. Как упоминалось во введении, ожидаемый закон их спадаания - экспоненциальный. Рассмотрев асимптотическое поведение этого ответа при  $\rho \gg 1$  ( $R \gg a/|m|$ ), убедимся в этом.

## 4.4 Асимптотическое поведение

Основной прием в вычислении рассматриваемых интегралов - метод перевала. Для простоты разберем сперва конкретный пример вычисления.

### 4.4.1 Пример вычисления

Считаем

$$L = \int d\kappa \frac{|\kappa|}{\vartheta_-} e^{-t\vartheta_-} e^{t\mathcal{D}(\kappa^2)} J_0(\kappa\rho) (\vartheta_- + \text{sgn} M \mathcal{M}(\kappa^2)) \quad (4.36)$$

Возникает трудность: подынтегральная функция не является аналитической функцией из-за наличия  $|\kappa|$  (корни идущие из спектра после выбора разрезов проблем не создают). Чтобы работать с ней как с аналитической функцией комплексного переменного мы заменяем:

$$|\kappa| = \lim_{q \rightarrow 0} \sqrt{\kappa^2 + q^2}$$

с разрезами вдоль мнимой оси. В дальнейшем подобное выражение для модуля уточняться не будет, но стоит держать его в голове.

Сделаем также тождественное преобразование, которое позволит явно использовать метод перевала:

$$J_0(z) = \text{Re}(H_0^{(1)}(|z|))$$

Такая замена мотивирована “плохим поведением” функции Бесселя на мнимой оси - она экспоненциально растет по мере удаления от действительной оси. Функция  $H_0^{(1)}$ , с другой стороны, экспоненциально убывает вдоль мнимой оси. Более того асимптотическое выражение для  $H_0^{(1)}$  проще.

Наложим некоторые ограничения на  $\vartheta$ : пусть  $\vartheta$  является корнем из полинома конечной степени:  $\vartheta(\kappa) = \sqrt{f(\kappa)}$  (соответственно  $\mathcal{M}$ ,  $\mathcal{A}$ ,  $\gamma$  - тоже полиномы), имеющего только один минимум в некоторой точке  $\kappa_0$  при этом дополнительно предполагаем, что функции  $\vartheta \pm \mathcal{D}$  имеют также только один минимум - все это соответствует случаю ВNZ, который является основной целью данного рассмотрения. Отметим, что  $\kappa_0 \sim \gamma$  (считаем также  $\gamma > 0$ ). На самом деле помимо этих требований необходимо наложить еще несколько, но их обсуждение будет приведено позже. Также по ходу вычисления стоит параллельно с общим рассматривать случай со спектром  $\pm\sqrt{1 + (k - \gamma)^2}$ , поскольку для него все получается очень наглядно.

С учетом всех сделанных выше замечаний:

$$L = \text{Re} \int d\kappa \frac{|\kappa|}{\sqrt{f(\kappa)}} e^{-t\sqrt{f(\kappa)}} e^{t\mathcal{D}(\kappa^2)} H_0^{(1)}(|\kappa|\rho) (\sqrt{f(\kappa)} + \text{sgn} M \mathcal{M}(\kappa^2)) \quad (4.37)$$



Разбиваем его на две части: от и до минимума  $\kappa_0$  функции  $f(\kappa)$ , вторую часть сопрягаем под знаком действительной части.

$$L = \operatorname{Re} \left( \int_{-\infty}^{\kappa_0} d\kappa \frac{|\kappa|}{\sqrt{f(\kappa)}} e^{-t\sqrt{f(\kappa)}} e^{t\mathcal{D}(\kappa^2)} H_0^{(1)}(|\kappa|\rho)(\sqrt{f(\kappa)} + \operatorname{sgn}MM(\kappa^2)) + \right. \\ \left. + \int_{\kappa_0}^{\infty} d\kappa \frac{|\kappa|}{\sqrt{f(\kappa)}} e^{-t\sqrt{f(\kappa)}} e^{t\mathcal{D}(\kappa^2)} H_0^{(2)}(|\kappa|\rho)(\sqrt{f(\kappa)} + \operatorname{sgn}MM(\kappa^2)) \right) \quad (4.38)$$

До и после  $\kappa_0$  идут интервалы монотонности функции  $\epsilon = \sqrt{f(\kappa)}$ , поэтому естественно перейти к "энергетическим" координатам вместо импульсов, т.е. как независимую переменную рассматривать далее  $\epsilon$ . Рассмотрим прямую, соответствующую постоянной  $\epsilon$ . Если  $\epsilon$  лежит выше минимума функции  $\sqrt{f(\kappa)}$ , то есть две точки пересечения (действительных) этой прямой и  $\sqrt{f(\kappa)}$ :  $\kappa_2(\epsilon)$  слева и  $\kappa_1(\epsilon)$  справа. При понижении  $\epsilon$  эти точки сближаются (см. рис. 4.2) и, когда  $\epsilon$  становится ниже минимума  $\sqrt{f(\kappa)}$ , точка  $\kappa_1$  поднимается в комплексную плоскость, а  $\kappa_2$  становится ей сопряженной, т.е. опускается вниз (комплексные волновые вектора понадобятся позже). В итоге в координатах энергии интеграл записывается как

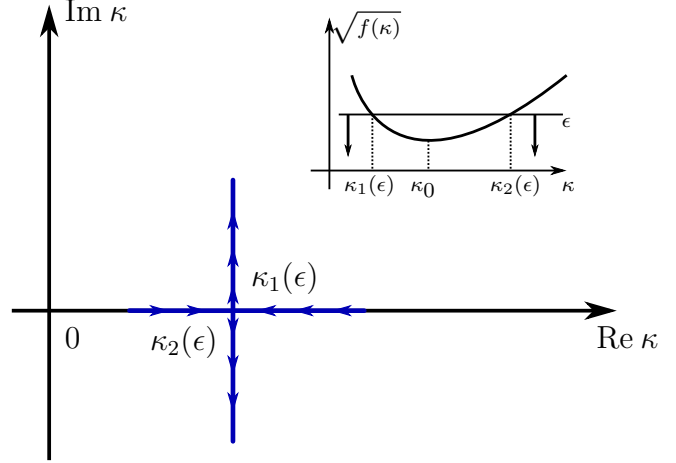


Рис. 4.2: Точки  $\kappa_1(\epsilon)$ ,  $\kappa_2(\epsilon)$

$$L = \operatorname{Re} \left( \int_{\epsilon_0}^{\infty} \frac{|\kappa_1(\epsilon_1)| d\epsilon_1}{\epsilon_1} \frac{d\kappa_1(\epsilon_1)}{d\epsilon_1} e^{t\mathcal{D}(\kappa_1^2)} e^{-t\epsilon_1} H_0^{(1)}(|\kappa_1(\epsilon_1)|\rho)(\epsilon_1 + \operatorname{sgn}MM(\kappa_1^2)) + \right. \\ \left. + \int_{\epsilon_0}^{\infty} \frac{|\kappa_2(\epsilon_2)| d\epsilon_2}{\epsilon_2} \left( -\frac{d\kappa_2(\epsilon_2)}{d\epsilon_2} \right) e^{t\mathcal{D}(\kappa_2^2)} e^{-t\epsilon_2} H_0^{(2)}(|\kappa_2(\epsilon_2)|\rho)(\epsilon_2 + \operatorname{sgn}MM(\kappa_2^2)) \right) \quad (4.39)$$

Тут  $\epsilon_0 = \sqrt{f(\kappa_0)}$ . Теперь используем метод перевала, предполагая, что перевальные точки интегралов будут расположены так, что  $|\kappa_i\rho| \gg 1$ . Ввиду последнего условия можно пользоваться асимптотическими выражениями для  $H$  пренебрегая поправками:

$$H_0^{(1)}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} e^{ix - i\frac{\pi}{4}} \left( 1 + O\left(\frac{1}{x}\right) \right) \\ H_0^{(2)}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} e^{-ix + i\frac{\pi}{4}} \left( 1 + O\left(\frac{1}{x}\right) \right)$$

Поскольку  $\kappa_0 > 0$ , в точках перевала  $\operatorname{Re}(\kappa) > 0$  (например, можно рассмотреть, как уже упоминалось, простую модель с  $f(\kappa) = 1 + (\kappa - \gamma)^2$ . В ней перевальные точки  $\gamma \pm i$ ). В таком случае модуль просто снимается и уравнения определяющие перевальные точки для соответственно интегралов по  $\epsilon_1$  и  $\epsilon_2$ :

$$\frac{d\kappa_1}{d\epsilon_1} = -i \frac{t}{R} \left( 1 - \frac{d\mathcal{D}}{d\kappa_1} \frac{d\kappa_1}{d\epsilon_1} \right) \rightarrow \epsilon_1 = -i f'(\kappa_1(\epsilon_1)) \frac{t}{2R} \left( 1 - \frac{d\mathcal{D}}{d\kappa_1} \frac{d\kappa_1}{d\epsilon_1} \right) \quad (4.40)$$

$$-\frac{d\kappa_2}{d\epsilon_2} = -i \frac{t}{R} \left( 1 - \frac{d\mathcal{D}}{d\kappa_2} \frac{d\kappa_2}{d\epsilon_2} \right) \rightarrow \epsilon_2 = -i (-f'(\kappa_2(\epsilon_2))) \frac{t}{2R} \left( 1 - \frac{d\mathcal{D}}{d\kappa_2} \frac{d\kappa_2}{d\epsilon_2} \right) \quad (4.41)$$

Параметр  $\frac{t}{R}$  - хороший малый параметр (это будет показано позже), в нулевом порядке по нему решение  $\epsilon_{1/2} = 0$ . В первом исчезающем порядке перевальная точка расположена в

$$\begin{aligned}\epsilon_1 &= \frac{t}{2R} [-if'(\kappa_1(0))] \\ \epsilon_2 &= \frac{t}{2R} [-i\{-f'(\kappa_2(0))\}] \end{aligned} \quad (4.42)$$

Стоит отметить, что для простых случаев (ВНЗ без  $\gamma$  или наоборот модель с  $f(\kappa) = 1 + (\kappa - \gamma)^2$ ) эти точки лежат на действительной оси. Как уже упоминалось выше, при  $\epsilon$ , лежащем "под" графиком  $f(k)$ , точки  $\kappa_1$  и  $\kappa_2$  сопряжены, а из этого следует и что перевальный  $\epsilon_1$  сопряжен с  $\epsilon_2$ . Вычислим теперь вторую производную в перевальной точке с нужной точностью:

$$\frac{d^2\kappa_1}{d\epsilon_1^2} = \frac{2}{f'(\kappa_1(0))} \quad (4.43)$$

$$\frac{d^2\kappa_2}{d\epsilon_2^2} = \frac{2}{f'(\kappa_2(0))} \quad (4.44)$$

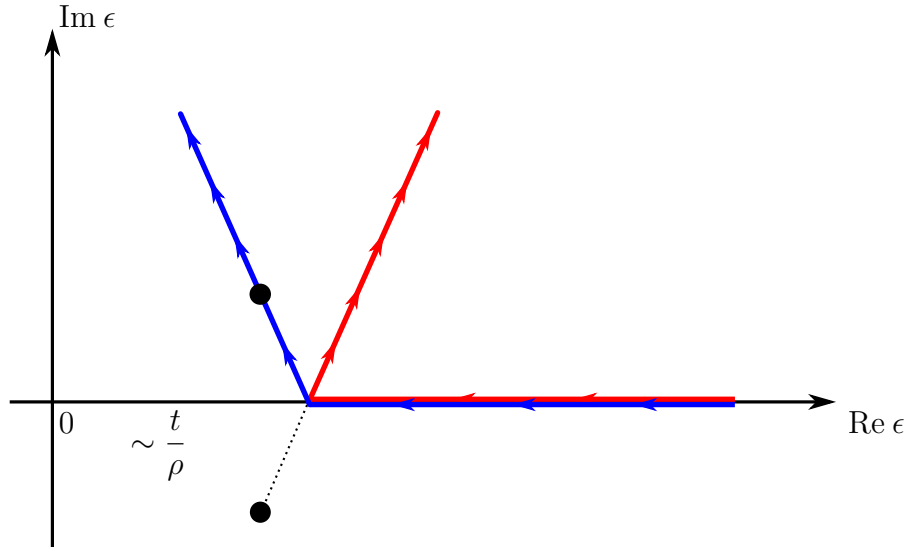


Рис. 4.3: Контур интегрирования по  $\epsilon_1$  (синий) и по  $\epsilon_2$  (красный). Черные жирные точки - седловые

Теперь все почти готово к применению метода перевала. Осталось уточнить, как вести контур к точке перевала. Удобным контуром был бы контур, изображенный на рисунке 4.3. Однако при деформации исходного контура по  $\epsilon_2$  мы обязательно наткнемся на точку ветвления  $|k_2(\epsilon_2)|$ . Пока будем считать, что этой проблемы нет и вернемся к ней позже (в итоге вклада она не дает). В итоге наш суммарный ответ состоит из перевала по  $\epsilon_1$ , перевала по  $\epsilon_2$  и двух интегралов по  $\epsilon$  вдоль действительной оси. Перевальная часть дает конечный вклад в ответ, а интегралы вдоль действительной оси вклада не дают. Действительно, не уточняя до какой точки ведется интегрирование:

$$\begin{aligned} & \text{Re} \left( \int_a^{\epsilon_0} \frac{\kappa_1(\epsilon_1) d\epsilon_1}{\epsilon_1} \frac{d\kappa_1(\epsilon_1)}{d\epsilon_1} e^{t\mathcal{D}(\kappa_1^2)} e^{-t\epsilon_1} H_0^{(1)}(\kappa_1(\epsilon_1)\rho) (\epsilon_1 + \text{sgn}MM(\kappa_1^2)) + \right. \\ & \left. + \int_a^{\epsilon_0} \frac{\kappa_2(\epsilon_2) d\epsilon_2}{\epsilon_2} \left( -\frac{d\kappa_2(\epsilon_2)}{d\epsilon_2} \right) e^{t\mathcal{D}(\kappa_2^2)} e^{-t\epsilon_2} H_0^{(2)}(\kappa_2(\epsilon_2)\rho) (\epsilon_2 + \text{sgn}MM(\kappa_2^2)) \right) \end{aligned} \quad (4.45)$$

С учетом сказанного выше  $k_1(\epsilon) = q(\epsilon)$ ,  $k_2(\epsilon) = q^*(\epsilon)$ .

$$\begin{aligned} & \operatorname{Re} \left( \int_a^{\epsilon_0} \frac{qd\epsilon}{\epsilon} \frac{dq}{d\epsilon} e^{t\mathcal{D}(q^2)} e^{-t\epsilon} H_0^{(1)}(q\rho)(\epsilon + \operatorname{sgn}MM(q^2)) + \right. \\ & \left. + \int_a^{\epsilon_0} \frac{q^*d\epsilon}{\epsilon} \left( -\frac{dq^*}{d\epsilon} \right) e^{t\mathcal{D}(q^{*2})} e^{-t\epsilon} H_0^{(2)}(q^*\rho)(\epsilon + \operatorname{sgn}MM(q^{*2})) \right) \end{aligned} \quad (4.46)$$

Видим что получилось выражение вида

$$\operatorname{Re}(c - c^*) = 0$$

Таким образом, остается лишь перевальная часть. Перед тем как ее явно выписать введем удобные обозначения:

$$-if'(\kappa_1(0)) = c_f^2 e^{2i\phi_f}, \quad i\xi e^{i\phi_\xi} = \kappa_1(0), \quad \operatorname{sgn}MM(\kappa_1^2(0)) = c_b e^{i\phi_b} \quad (4.47)$$

Мотивировка этих обозначений такая: для  $f(\kappa) = 1 + (\kappa - \gamma)^2$  верно  $\phi_f = 0$ . Стоит отметить, что в рассматриваемом случае  $c_f \sim 1$ . Если в таком случае  $\gamma = 0$ , то  $\phi_\xi = 0$ . Таким образом ненулевой  $\phi_\xi$  соответствует наличию  $\gamma$ . В этих обозначениях интеграл:

$$\begin{aligned} L = & \operatorname{Re} \left( \frac{2}{c_f^2} i\xi e^{i\phi_\xi} e^{-\frac{t^2}{4\rho} c_f^2 e^{2i\phi_f} - \xi e^{i\phi_\xi} \rho - i\phi_f} \sqrt{\frac{2}{\pi i \xi e^{i\phi_\xi} \rho}} e^{-i\frac{\pi}{4}} c_b e^{i\phi_b} e^{t\mathcal{D}(\kappa_1^2(0))} \int_{-b}^{\infty} dy e^{-\frac{\rho}{c_f^2} y^2} + \right. \\ & \left. + \frac{2}{c_f^2} (-i\xi e^{-i\phi_\xi}) e^{-\frac{t^2}{4\rho} c_f^2 e^{-2i\phi_f} - \xi e^{-i\phi_\xi} \rho + i\phi_f} \sqrt{\frac{2}{-\pi i \xi e^{-i\phi_\xi} \rho}} e^{i\frac{\pi}{4}} c_b e^{-i\phi_b} e^{t\mathcal{D}(\kappa_2^2(0))} \int_b^{\infty} dy e^{-\frac{\rho}{c_f^2} y^2} \right) \end{aligned} \quad (4.48)$$

Наличие  $b$  говорит о том, что при конечном  $\phi_f$  (как на рисунке) перевальные точки отходят от действительной оси, в то время как контур с нее выходит на перевал. Совершая сопряжение во втором слагаемом мы видим что интегралы собираются в полный перевальный интеграл. Упрощая, по возможности, приходим к окончательному выражению

$$\operatorname{Re} \left( \frac{2}{c_f} \sqrt{\frac{2\xi}{\rho^2}} c_b e^{i\phi_b} e^{t\mathcal{D}(\kappa_1^2(0))} e^{-\frac{t^2}{4R} c_f^2 e^{2i\phi_f} - \xi e^{i\phi_\xi} R - i\phi_f + \frac{i}{2}\phi_\xi} \right) \quad (4.49)$$

Видим, что в соответствии с ожиданиями интеграл (а тогда и константы взаимодействия) спадает экспоненциально с расстоянием. Характерный масштаб затухания (в частности для модели ВNZ) -  $\rho \sim 1$ . Осталось ответить на возникшие по ходу вычисления вопросы вопросы.

Во-первых, обоснуем, что  $\frac{t}{\rho}$  действительно малый параметр. Видим в итоговом выражении 4.49 множитель вида  $e^{-\frac{t^2}{\rho}}$ , который зарезает интегрирование по  $t$  на  $t \sim \sqrt{\rho}$ . Таким образом,  $\frac{t}{\rho} \sim \frac{1}{\sqrt{\rho}}$ , что в пределе  $\rho \gg 1$  обосновывает требуемое утверждение.

Теперь вернемся к замечанию о ветвлении модуля. В интеграле по  $\epsilon_1$  проблем не возникает, см. рис. 4.4a, где показано как деформируется контур в  $\kappa$  пространстве для такого интеграла. Вдоль мнимой оси проведен разрез функции  $|\kappa|$  (зеленым на рисунке), в правой полуплоскости ниже и выше оси абсцисс расположены разрезы  $\sqrt{f(\kappa)}$  (синим на рисунке). Например, для  $f(\kappa) = 1 + (\kappa - \gamma)^2$  разрезы идут из  $\gamma \pm i$  соответственно вверх и вниз, а в общем случае предполагаем схожую структуру разрезов. В интеграле же по  $\epsilon_2$  возникает проблема. На рисунке 4.4b однако показано, как можно деформировать контур в  $\kappa$  для такого интеграла. Часть контура отстоящая от мнимой оси соответствует контуру в  $\epsilon$  пространстве рассмотренному ранее. Осталось показать, что часть

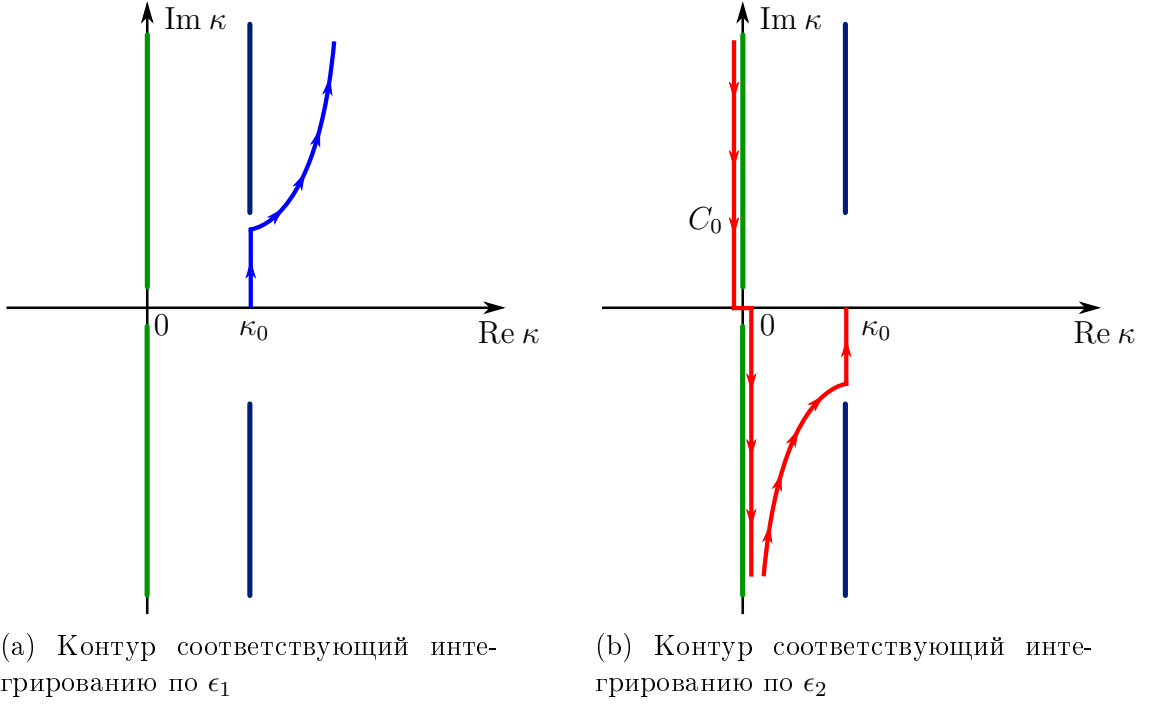


Рис. 4.4: Контур интегрирования в импульсном пространстве. Зеленым выделен разрез  $|\kappa|$ , темно-синим - разрез  $\sqrt{f(\kappa)}$

контура, "сидящая" на разрезе модуля равна нулю (называем соответствующий контур  $C_0$ ). Обозначим

$$e^{t\mathcal{D}(\kappa^2)} e^{-t\sqrt{f(\kappa)}} \frac{1}{\sqrt{f(\kappa)}} (\sqrt{f(\kappa)} + \text{sgn}MM(\kappa^2)) = g(\kappa)$$

Предполагаем, что у этой функции точки ветвления расположены при  $\kappa > 0$ , т.е. для этой функции контур "выглядит" прямым, в отличие от  $\kappa$ , для которого мнимая часть разная с разных сторон мнимой оси. Тогда

$$\begin{aligned} & \text{Re} \int_{C_0} |\kappa| d\kappa H_0^{(2)}(|\kappa|R) g(\kappa) = \\ & \text{Re} \left( \int_{-\infty}^0 -i\kappa d\kappa H_0^{(2)}(-i\kappa R) g(i\kappa) + \int_0^{-\infty} i\kappa d\kappa H_0^{(2)}(i\kappa R) g(i\kappa) \right) \end{aligned} \quad (4.50)$$

Интегралы сходятся т.к. на мнимой оси  $H_0^{(2)}$  растет экспоненциально при увеличении аргумента. Сделаем замены переменных

$$\text{Re} \left( - \int_0^{\infty} \kappa d\kappa H_0^{(2)}(-i\kappa R) g(i\kappa) - \int_0^{\infty} \kappa d\kappa H_0^{(2)}(-i\kappa R) g(-i\kappa) \right) \quad (4.51)$$

Т.к. на мнимой оси эта функция Бесселя чисто мнимая и получаем выражение, зануление которого очевидно:

$$\text{Re}(ic + ic^*) = 0$$

#### 4.4.2 Итоговый результат

Все прочие вычисления проводятся в достаточной степени аналогично вышешприведенному. Так как в итоговый ответ входят комбинации  $L \cdot P$ , из него полностью выпадает  $t\text{Re}\mathcal{D}(\kappa_1^2(0))$  в экспонентах. Условие на малость мнимой части:  $\rho \ll \frac{1}{\gamma^2|m|^2}$ . Физически

оно выполнено для рассматриваемых случаев с большим запасом. Действительно это условие можно переписать как  $\rho \ll \frac{\xi^2}{\Delta^2}$ . В модели ВНЗ это отношение имеет порядок  $10^4$  и при уменьшении параметров  $B$  и  $D$  стремительно растет. Из-за перевального характера интегралов в пределе больших расстояний большинство ответов для них одинаковые (это следует из того, что в точке перевала в низшем порядке  $\kappa_1 - \gamma = i \operatorname{sgn} M M$  и аналогично для  $\kappa_2$ ). Введем, мотивируясь этим функции, через которые все будет выражаться

$$Q_\nu = \int d\kappa \frac{|\kappa|}{\vartheta_-} e^{-t\vartheta_-} J_\nu(\kappa\rho) \operatorname{sgn} M M \quad (4.52)$$

Определим

$$\begin{aligned} F_c(r) &= F_c(\rho|m|/a) = \frac{|M|^3}{A^4 16\pi^2} \int_0^\infty dt (Q_0^2 - Q_1^2) \\ F_s(r) &= F_s(\rho|m|/a) = \frac{|M|^3}{A^4 16\pi^2} \int_0^\infty dt (2Q_0 Q_1) \\ F(r) &= F(\rho|m|/a) = \frac{|M|^3}{A^4 16\pi^2} \int_0^\infty dt (Q_0^2 + Q_1^2) \end{aligned} \quad (4.53)$$

Тогда выражение для взаимодействия принимает вид:

$$H_{\text{IEI}} = \sum_{i,j} K_{ij} S_i^A S_j^B \quad (4.54)$$

Обозначим  $J_z = J_1 + J_2$ . В таком случае

$$\begin{aligned} K_{zz} &= J_z^A J_z^B F_c \\ K_{xx} &= -4J_0^A J_0^B F_c n_x^2 + J_{mix}^A J_{mix}^B F n_x^2 + J_{mix}^A J_{mix}^B F_c n_y^2 - 2 \operatorname{sgn} M F_s (J_{mix}^A J_0^B + J_0^A J_{mix}^B) n_x n_y \\ K_{xy} &= -4J_0^A J_0^B F_c n_x n_y + J_{mix}^A J_{mix}^B (F_c - F) n_x n_y - 2 \operatorname{sgn} M J_{mix}^A J_0^B F_s n_x^2 - 2 \operatorname{sgn} M J_0^A J_{mix}^B F_s n_y^2 \\ K_{xz} &= 2 \operatorname{sgn} M J_0^A J_z^B F_c n_x + J_{mix}^A J_z^B F_s n_y \end{aligned}$$

Также как и для  $U$ ,  $K_{yy}$ ,  $K_{yx}$ ,  $K_{yz}$  получаются из  $K_{xx}$ ,  $K_{xy}$ ,  $K_{xz}$  заменой  $n_x$  на  $n_y$  и  $n_y$  на  $n_x$ .  $K_{zx}$  и  $K_{zy}$  равны соответственно  $-K_{xz}$  и  $-K_{yz}$ , если в последних еще поменять местами индексы примесей  $A$  и  $B$ . Таким образом, получена общая спиновая структура ответа в пределе больших расстояний. Осталось произвести интегрирование по  $t$  для функций  $F$ ,  $F_s$ ,  $F_c$ . Полученные интегралы - Гауссовы. Не вдаваясь в детали вычисления

$$\begin{aligned} F(r) &= \frac{|M|^3 \xi c_b^2 e^{-2\xi \cos \phi_\xi \rho}}{A^4 c_f^3 (2\pi\rho)^{3/2}} \frac{1}{(\cos 2\phi_f)^{1/2}} \\ F_c(r) &= \frac{|M|^3 \xi c_b^2 e^{-2\xi \cos \phi_\xi \rho}}{A^4 c_f^3 (2\pi\rho)^{3/2}} \cos(2\xi \sin \phi_\xi \rho - \phi_\xi - 2\phi_b + 3\phi_f) \\ F_s(r) &= -\frac{|M|^3 \xi c_b^2 e^{-2\xi \cos \phi_\xi \rho}}{A^4 c_f^3 (2\pi\rho)^{3/2}} \sin(2\xi \sin \phi_\xi \rho - \phi_\xi - 2\phi_b + 3\phi_f) \end{aligned} \quad (4.55)$$

Таким образом полностью получен ответ для косвенного обменного взаимодействия в пределе больших расстояний. Как и ожидалось, константы взаимодействия экспоненциально спадают с расстоянием и, на фоне этого быстрого спадания есть абрикосовские осцилляции. Приведем ответ для модели ВНЗ (малый  $m$ ) в размерных единицах рас-

стояния с ненулевым  $\gamma$ :

$$\begin{aligned}
F(r) &= \frac{|M|^3}{A^4} \sqrt{1 + \gamma^2} \left( \frac{\lambda_1}{2\pi R} \right)^{3/2} e^{-\frac{R}{\lambda_1}} \\
F_c(r) &= \frac{|M|^3}{A^4} \sqrt{1 + \gamma^2} \left( \frac{\lambda_1}{2\pi R} \right)^{3/2} e^{-\frac{R}{\lambda_1}} \cos \left( \frac{R}{\lambda_2} - \arctan \gamma \right) \\
F_s(r) &= \frac{|M|^3}{A^4} \sqrt{1 + \gamma^2} \left( \frac{\lambda_1}{2\pi R} \right)^{3/2} e^{-\frac{R}{\lambda_1}} \sin \left( \frac{R}{\lambda_2} - \arctan \gamma \right)
\end{aligned} \tag{4.56}$$

Здесь

$$\begin{aligned}
\lambda_1 &= \frac{a}{2|m|} [1 + (1 - \gamma^2)m \cosh \chi] \\
\lambda_2 &= \frac{a}{2|m|\gamma} [1 + 2m \cosh \chi]
\end{aligned}$$

Видим, что длина спадаания, в виду малости  $m$ , примерно равна  $\frac{A}{2|M|}$  в исходных параметрах задачи, т.е.  $A$ , предсказуемо, выступает в качестве характерной скорости электронов. Масштаб осцилляций для реалистичных параметров немного больше масштаба затухания и примерно равен  $\frac{A}{2\Delta}$ . Вычисленные значения характерных длин приведены в таблицу 4.2.

Таблица 4.2: Характерные длины

$d$ , nm	$\lambda_1$ , nm	$\lambda_2$ , nm
5.5	22	27
7.0	22	25

В модели ВНЗ, если  $\gamma = 0$ , ответ переходит в

$$\begin{aligned}
H_{\text{IEI}} &= F(J_z^A J_z^B S_z^A S_z^B - 4J_0^A J_0^B (\mathbf{S}_{\parallel}^A \cdot \mathbf{n})(\mathbf{S}_{\parallel}^B \cdot \mathbf{n}) + J_{\text{mix}}^A J_{\text{mix}}^B (\mathbf{S}_{\parallel}^A \cdot \mathbf{S}_{\parallel}^B) \\
&\quad + 2\text{sgn}M J_0^A J_z^B (\mathbf{S}_{\parallel}^A \cdot \mathbf{n}) S_z^B - 2\text{sgn}M J_0^B J_z^A (\mathbf{S}_{\parallel}^B \cdot \mathbf{n}) S_z^A)
\end{aligned} \tag{4.57}$$

Это следует из зануления интеграла  $Q_1$  по нечетности.

Стоит отметить, что  $zz$  взаимодействие в таком случае носит антиферромагнитный характер при условии, что примеси расположены на одной высоте (одинаковые  $J$ ) или близких высотах ( $J$  имеют одинаковый знак). Более того для примесей в центре ямы:

$$H_{\text{IEI}} = F(J_z^2 S_z^A S_z^B + J_1^2 (\mathbf{S}_{\parallel}^A \cdot \mathbf{S}_{\parallel}^B)) \tag{4.58}$$

Завершая этот раздел отметим, что на расстояниях  $\sim a/|m|$  верно  $\frac{F}{|M|} \ll 1$ , что оправдывает применение теории возмущений.

## 4.5 Анизотропия

В конце концов, рассмотрим вопрос об анизотропии для примесей, связанной с наличием окружающих электронов. Во втором порядке теории возмущений помимо члена, отвечающего за взаимодействие примесей, есть, конечно, и члены, в которые каждая из примесей входит два раза. Соответствующие интегралы имеют следующий вид:

$$H_a = \frac{1}{2} \mathcal{V}^{\alpha\beta} \mathcal{V}^{\gamma\delta} \Pi_{\beta\gamma, \delta\alpha} = \frac{1}{2} \mathcal{V}^{\alpha\beta} \mathcal{V}^{\gamma\delta} \int \frac{d\omega}{2\pi} G_{\beta\gamma}(i\omega, 0) G_{\delta\alpha}(i\omega, 0) \tag{4.59}$$

Видим, что интегралы набираются по всей зоне Бриллюэна, а поэтому нельзя применять модель ВNZ. Однако, тем не менее, будем считать, что электроны описываются следующим гамильтонианом:

$$H = \begin{pmatrix} h & f & 0 & g \\ f^* & j & -g & 0 \\ 0 & -g & h & -f^* \\ g & 0 & -f & j \end{pmatrix} \quad (4.60)$$

Где  $f$  - нечетная функция,  $h, j, g$  - четные функции волнового вектора. В таком случае, получаем следующий вид анизотропии:

$$H_a = DS_z^2 + C(S_x S_y + S_y S_x) \quad (4.61)$$

Тут  $C = 0$  при  $g = 0$ . Подобная анизотропия создает выделенное направление (или несколько), тем более по порядку величины она может значительно превосходить межпримесное взаимодействие. Однако, относительное направление примесей определяется именно косвенным обменом между примесями.

## Глава 5

### Заключение

В данной работе было исследовано косвенное обменное взаимодействие между магнитными примесями в квантовой яме CdTe/HgTe/CdTe. Эта квантовая яма является примером двумерного топологического изолятора и при толщине больше некоторого критического значения переходит в топологически нетривиальную фазу, в которой присутствуют краевые состояния. В данной работе рассмотрены примеси в толще квантовой ямы, поэтому эффекты, связанные с краевыми состояниями не учитывались. Их учет в упрощенной модели был проведен в работе [27]. Поведение электронов в толще кристаллов CdTe и HgTe описывается гамильтонианом Кейна 2.8. Если из этих кристаллов построена квантовая яма, то появляются двумерные состояния. При толщине близкой к критической две двукратно вырожденные ветки -  $E1$  и  $H1$  - расположены близко друг к другу, и, когда химический потенциал расположен между ними, именно они определяют косвенное обменное взаимодействие магнитных примесей. Низкоэнергетический Гамильтониан, описывающий электроны в этих состояниях носит название гамильтониана Берневига-Хьюза-Жанга 2.13, процесс его получения был кратко освещен в данной работе.

Модель ВNZ усложняется если учесть отсутствие симметрии интерфейса относительно операции  $z \rightarrow -z$ . В работе [28] было показано, что для учета этого эффекта достаточно лишь немного модифицировать гамильтониан ВNZ. С учетом этого обстоятельства, далее в работе был рассмотрен модифицированный гамильтониан ВNZ 2.18, и гамильтониан еще более общего вида 4.12.

В рамках исследования получено выражение для гамильтониана магнитной примеси в рассматриваемой квантовой яме 3.13. На его основе, с применением теории возмущений для термодинамического потенциала, было получено выражение для энергии косвенного обменного взаимодействия 4.30. Были вычислены асимптотические выражения для этого взаимодействия при больших расстояниях 4.54. Основные черты взаимодействия:

- Помимо обычного Гейзенберговского взаимодействия примесей есть множество других слагаемых. Некоторые из них при особенно симметричном расположении примесей собираются во взаимодействие типа Дзялошинского-Мории.
- Энергия косвенного обмена экспоненциально падает при увеличении расстояния между примесями.
- Если интерфейс несимметричен ( $\gamma \neq 0$ ), возникают осцилляции в косвенном обменном взаимодействии, частота которых пропорциональна параметру несимметричности интерфейса  $\gamma$ . Это находится в соответствии с результатом Абрикосова



[22], показавшего, что в полупроводниках при несоответствии дна зоны проводимости и потолка валентной зоны (химический потенциал в щели) возникают осцилляции констант косвенного обмена.

Помимо всего прочего был качественно рассмотрен вопрос об анизотропии для магнитных примесей.

# Глава 6

## Список литературы

- [1] C. L. Kane and E. J. Mele, “Z2 topological order and the quantum spin Hall effect,” *Phys. Rev. Lett.* 95, 146802 (2005).
- [2] B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, “Quantum spin Hall effect and topological phase transition in HgTe quantum wells,” *Science* 314, 1757 (2006)
- [3] M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, “Quantum spin Hall insulator state in HgTe quantum wells,” *Science* 318, 766 (2007)
- [4] Xiao-Liang Qi and Shou-Cheng Zhang, “Topological insulators and superconductors,” *Rev. Mod. Phys.* 83, 1057 (2011).
- [5] M. Z. Hasan and C. L. Kane, “Colloquium : Topological insulators,” *Rev. Mod. Phys.* 82, 3045 (2010).
- [6] J. Maciejko, Ch. Liu, Y. Oreg, X.-L. Qi, C. Wu, and S.-C. Zhang, “Kondo effect in the helical edge liquid of the quantum spin Hall state,” *Phys. Rev. Lett.* 102, 256803 (2009).
- [7] Y. Tanaka, A. Furusaki, and K. A. Matveev, “Conductance of a helical edge liquid coupled to a magnetic impurity,” *Phys. Rev. Lett.* 106, 236402 (2011).
- [8] M. A. Ruderman and C. Kittel, “Indirect exchange coupling of nuclear magnetic moments by conduction electrons,” *Phys. Rev.* 96, 99 (1954).
- [9] T. Kasuya, “A theory of metallic ferro- and antiferromagnetism on Zeners model,” *Prog. Theor. Phys.* 16, 45 (1956).
- [10] K. Yosida, “Magnetic properties of Cu-Mn alloys,” *Phys. Rev.* 106, 893 (1957).
- [11] Q. Liu, C.-X. Liu, C. Xu, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, “Magnetic impurities on the surface of a topological insulator,” *Phys. Rev. Lett.* 102, 156603 (2009).
- [12] F. Ye, G. H. Ding, H. Zhai, and Z. B. Su, “Spin helix of magnetic impurities in two-dimensional helical metal,” *EPL* 90, 47001 (2010).
- [13] I. Garate and M. Franz, “Magnetoelectric response of the time-reversal invariant helical metal,” *Phys. Rev. B* 81, 172408 (2010).
- [14] Rudro R. Biswas and A. V. Balatsky, “Impurity-induced states on the surface of three-dimensional topological insulators,” *Phys. Rev. B* 81, 233405 (2010).

- [15] D. A. Abanin and D. A. Pesin, "Ordering of magnetic impurities and tunable electronic properties of topological insulators," *Phys. Rev. Lett.* 106, 136802 (2011).
- [16] J.-J. Zhu, D.-X. Yao, S.-C. Zhang, and K. Chang, "Electrically controllable surface magnetism on the surface of topological insulators," *Phys. Rev. Lett.* 106, 097201 (2011).
- [17] D. K. Efimkin and V. Galitski, "Self-consistent theory of ferromagnetism on the surface of a topological insulator," *Phys. Rev. B* 89, 115431 (2014).
- [18] Y. L. Chen, J.-H. Chu, J. G. Analytis, Z. K. Liu, K. Igarashi, H.-H. Kuo, X. L. Qi, S. K. Mo, R. G. Moore, D. H. Lu, M. Hashimoto, T. Sasagawa, S. C. Zhang, I. R. Fisher, Z. Hussain, and Z. X. Shen, "Massive Dirac fermion on the surface of a magnetically doped topological insulator," *Science* 329, 659 (2010).
- [19] L. A. Wray, S.-Y. Xu, Y. Xia, D. Hsieh, A. V. Fedorov, Y. S. Hor, R. J. Cava, A. Bansil, H. Lin, and M. Z. Hasan, "A topological insulator surface under strong Coulomb, magnetic and disorder perturbations," *Nat. Phys.* 7, 32 (2011).
- [20] S.-Y. Xu, M. Neupane, C. Liu, D. Zhang, A. Richardella, L. A. Wray, N. Alidoust, M. Leandersson, T. Balasubramanian, J. Sanchez-Barriga, O. Rader, G. Landolt, B. Slomski, J. H. Dil, J. Osterwalder, T.-R. Chang, H.-T. Jeng, H. Lin, A. Bansil, N. Samarth, and M. Z. Hasan, "Hedgehog spin texture and Berrys phase tuning in a magnetic topological insulator," *Nat. Phys.* 8, 616 (2012).
- [21] N. Bloembergen and T. J. Rowland, "Nuclear spin exchange in solids:  $Tl^{203}$  and  $Tl^{205}$  magnetic resonance in thallium and thallic oxide," *Phys. Rev.* 97, 1679
- [22] A. A. Abrikosov, "Spin glasses with short range interaction," *Adv. Phys.* 29, 869 (1980)
- [23] J. Ginter, J. Kossut, and L. Swierkowski, "Indirect exchange interaction via electrons in spinorbit coupled bands in semiconductors," *Phys. Status Solidi B* 96, 735 (1979).
- [24] C. Lewiner and G. Bastard, "Indirect exchange interactions in zero-gap semiconductors: Anisotropic effects," *Phys. Rev. B* 22, 2132 (1980).
- [25] G. Zarand and B. Janko, " $Ga_{1-x}Mn_xAs$ : A frustrated ferromagnet," *Phys. Rev. Lett.* 89, 047201 (2002).
- [26] I.I. Lyapilin and I.M. Tsidilkovskii, "Narrow-gap semimagnetic semiconductors," *Sov. Phys. Uspehi* 28, 349 (1985).
- [27] Курилович В. Д., "Косвенное обменное взаимодействие магнитных примесей, расположенных вблизи края двумерного топологического изолятора," выпускная квалификационная работа бакалавра (2016)
- [28] S. A. Tarasenko, M. V. Durnev, M. O. Nestoklon, E. L. Ivchenko, J.-W. Luo, and A. Zunger, "Split Dirac cones in HgTe/CdTe quantum wells due to symmetry-enforced level anticrossing at interfaces," *Phys. Rev. B* 91, 081302 (2015)
- [29] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, "Теоретическая физика. Том 3. Квантовая механика," Физматлит (2008)
- [30] M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, A. Jorio, "Group Theory: Application To The Physics Of Condensed Matter," Springer (2008)

- [31] G. Dresselhaus, "Spin-Orbit Coupling Effects in Zinc Blende Structures," *Phys. Rev.* 100, 580 (1955)
- [32] Xiao-Liang Qi and Shou-Cheng Zhang, "Topological insulators and superconductors," *Rev. Mod. Phys.* 83, 1057 (2011)
- [33] G. L. Bir and G. E. Pikus, "Symmetry and strained-induced effects in semiconductors," Wiley, New York (1975)
- [34] D.G. Rothe, et al., "Fingerprint of different spin-orbit terms for spin transport in HgTe quantum wells," *New Journal of Physics*, Volume 12, Issue 6, article id. 065012, 22 pp. (2010)
- [35] G. M. Minkov, A. V. Germanenko, O. E. Rut, A. A. Sherstobitov, S. A. Dvoretzki, and N. N. Mikhailov, "Hole transport and valence-band dispersion law in a HgTe quantum well with a normal energy spectrum," *Phys. Rev. B* 89, 165311 (2014)