Владимир Еналдиев,
И.В. Загороднев, В.А.Волков
Институт радиотехники и электроники РАН

Влияние интрефейсового потенциала на энергетический спектр поверхностных состояний топологического изолятора

arxiv:1407.0985

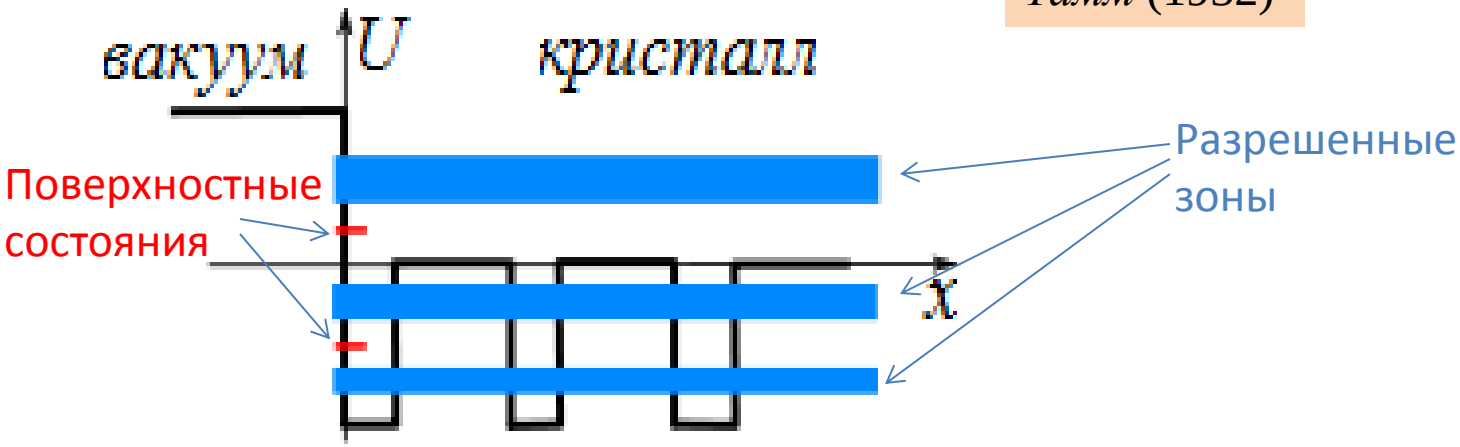
13-я Конференция молодых ученых
"Проблемы физики твердого тела и высоких давлений"

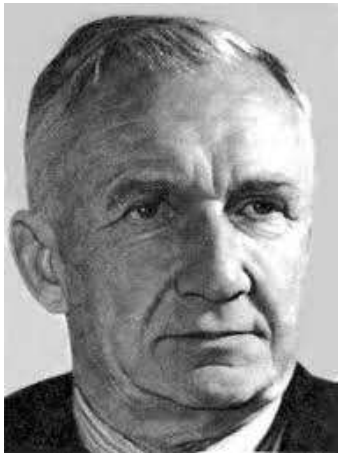
План

- Поверхностные состояния (ПС) в кристаллах
- Топологические изоляторы (ТИ)
- Влияние итерфейсового потенциала на спектр ПС в ТИ
- Выводы

Поверхностные состояния

Тамм (1932)





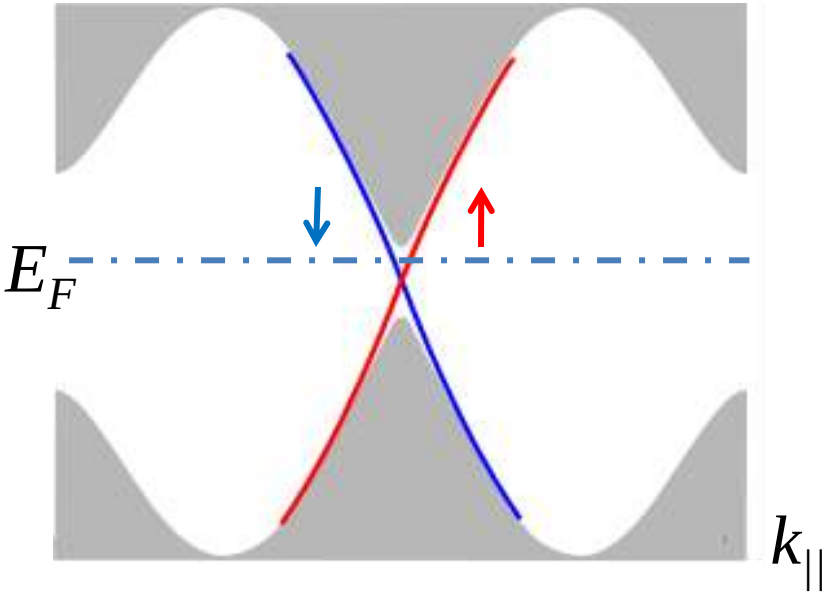
И.Е. Тамм

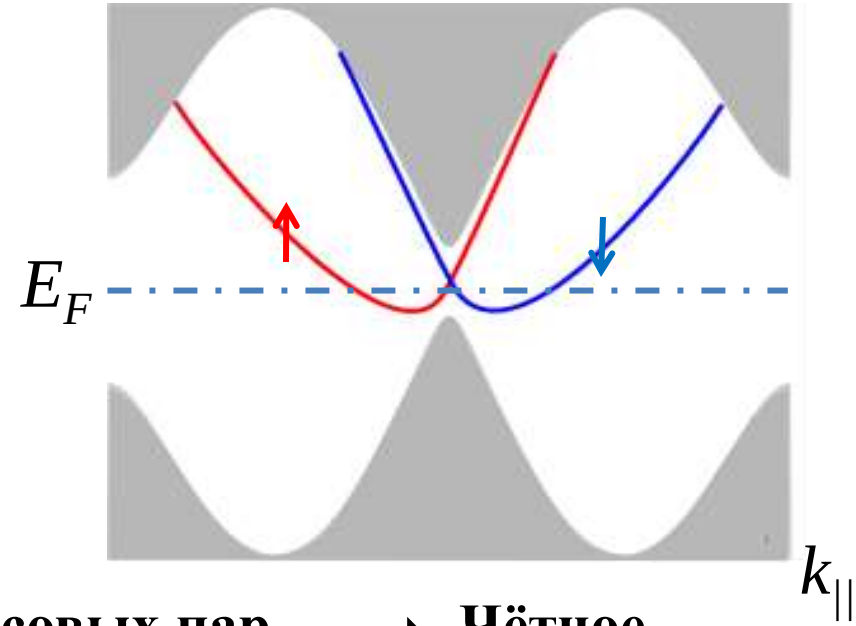
$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{\alpha}\vec{r}} u_{\vec{\alpha},n}(\vec{r})$$

$$\alpha_x = \alpha_x' + i\alpha_x'' \quad \alpha_x'' > 0$$ Для поверхностных состояний

Топологические изоляторы: 2D и 3D

2D ТИ (квантовый спин-холловский изолятор)





Нёчетное ⟵ **Число крамерсовых пар краевых состояний** ⟶ **Чётное**

Топологический изолятор

Обычный (тривиальный) изолятор

Bulk-boundary correspondence

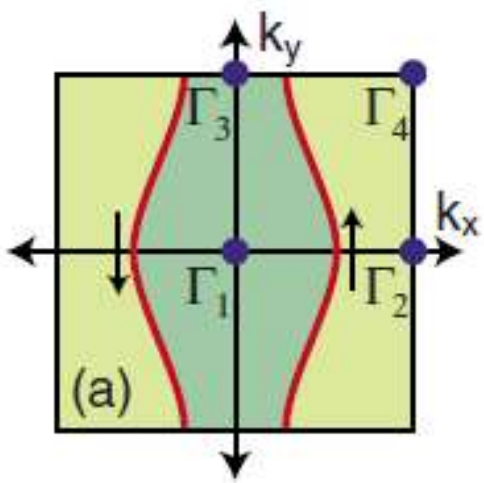
Z_2 инвариант: ν=N mod 2 (N – число пар краевых состояний)

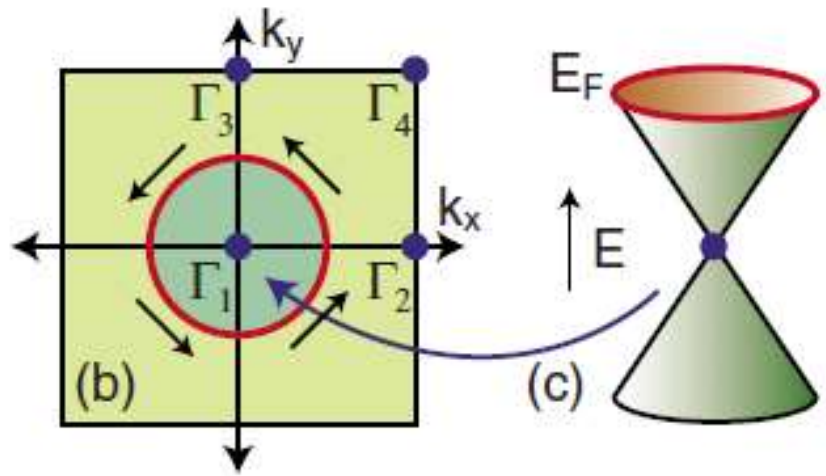
ν=1 (нечетное), ν=0 (четное)

Сильные и слабые 3D топологические изоляторы

Топологический инвариант: $\nu_0 = \mathbf{N} \bmod 2$

N – число точек Дирака, охватываемых дугой поверхности Ферми





ν_0 = 0: слабые ТИ

Дуга Ферми-поверхности охватывает ***четное*** число точек Дирака

ν_0 = 1: сильные ТИ

Дуга Ферми-поверхности охватывает ***нечетное*** число точек Дирака

Где обнаружена фаза ТИ?

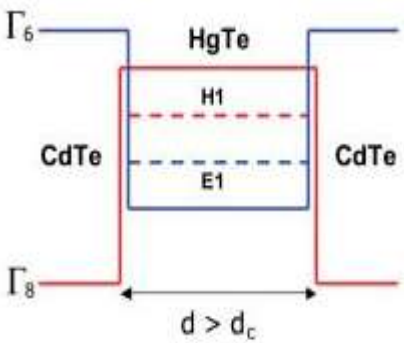
2D: в квантовых ямах $Cd_xHg_{1-x}Te/HgTe$

3D: кристаллы Bi_2Se_3, Bi_2Te_3, Sb_2Te_3, Bi_2Te_2Se ...

2D ТИ в квантовых ямах $Cd_xHg_{1-x}Te/HgTe$

kp - приближение

Bernevig (2006)



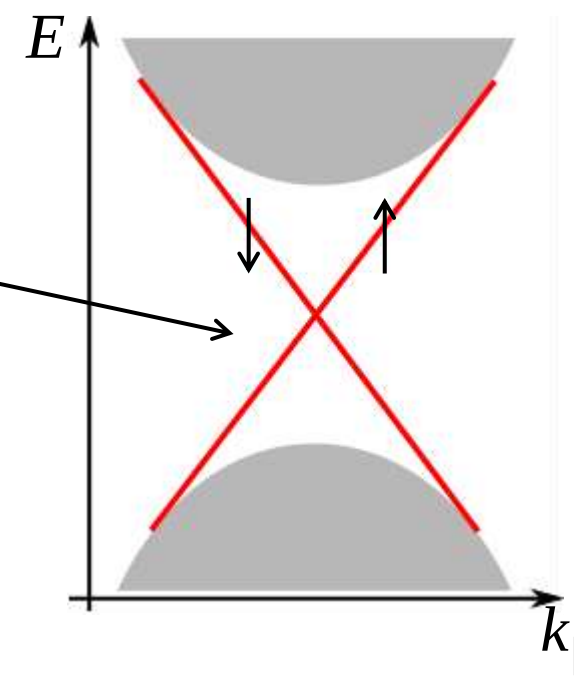
$$H_{eff}(k_x,k_y)=\begin{array}{c} \begin{array}{cc} \uparrow & \downarrow \end{array} \\ \begin{pmatrix} H(k) & 0 \\ 0 & H^*(-k) \end{pmatrix} \end{array} \qquad TH_{eff}T^{-1}=H_{eff}$$

$$H(k)=\varepsilon(k)+\begin{pmatrix} m-bk^2 & v\left(k_x-ik_y\right) \\ v\left(k_x+ik_y\right) & -m+bk^2 \end{pmatrix} \Rightarrow E=\varepsilon(k)\pm\sqrt{(m-bk^2)^2+v^2k^2}$$

$$\varepsilon(k)=c-dk^2$$

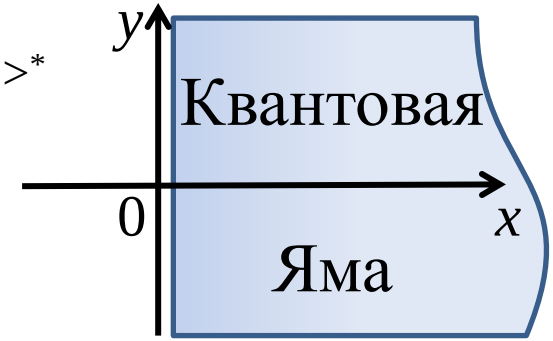
$$k^2=k_x{}^2+k_y{}^2$$

Z_2 инвариант $\nu = 1$ для H_{eff} только, когда $m/(2b) > 0$.
Из топологии => ***бесщелевые краевые состояния***
только при $d > d_c \approx 6.4$ нм, когда $\mathbf{m < 0}$ (т.к. $b < 0$)



Какой спектр краевых состояний возможен из H_{eff} ?

Краевые состояния в 2D ТИ в рамках *kp* - приближения



Общее граничное условие (ГУ) из $<\psi|H_{\text{eff}}|\phi> = <\phi|H_{\text{eff}}|\psi>^*$

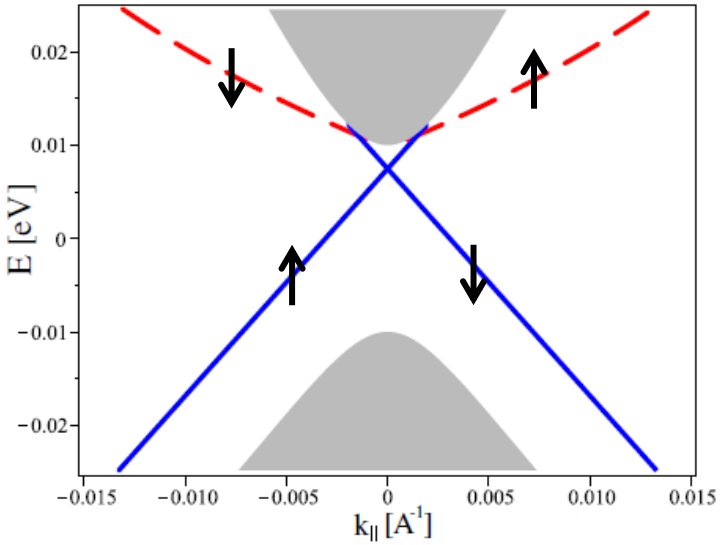
$$\partial_{\vec{n}}\psi + G\psi\big|_S = 0 \qquad \psi = (\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4)^T$$

$$G = \begin{pmatrix} g_1 & ig_3 & 0 & ig_6 \\ i(g_3+1) & g_4 & ig_6 & 0 \\ 0 & ig_6 & g_1 & -ig_3 \\ ig_6 & 0 & -i(g_3+1) & g_4 \end{pmatrix}$$

g_1, g_3, g_4, g_6 – граничные параметры, которые феноменологически определяют свойства потенциала интерфейса

При выводе матрицы G, считалось что интерфейс обладает T- инверсией и I_y: $y \to -y$

$$\psi \propto e^{\lambda x + ik_y y} \xrightarrow{\Re(\lambda) < 0} \text{ГУ} \longrightarrow \text{Спектр краевых состояний}$$



1) g1 = ∞, g4 = ∞, g3 = 0, g6 = 0

$$\psi\big|_{x=0} = 0$$

***топология** «работает»* в ***случае* 1)** !

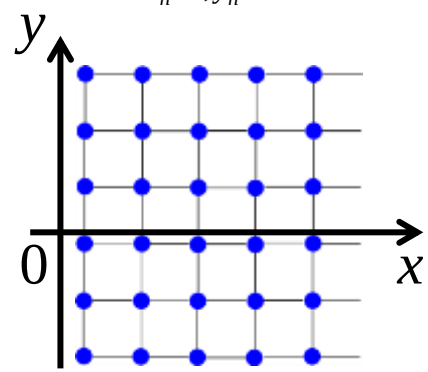
2) g1 = -2, g4 = ∞, g3 = 0, g6 = 0

что делать с ***топологией*** в ***случае* 2)** ?

Выход: экстраполировать H_{eff} на квадратную решетку в модели сильной связи с | s,1/2 >, |p_x+ip_y,1/2>, |s,-1/2>,|p_x-ip_y,-1/2> на атом.

$$\tilde{H} = (m_0 - 4b)\sum_n \Psi_n^{+}\sigma_0 \otimes \tau_z \Psi_n - i\frac{v}{2}\sum_n \left[\Psi_n^{+}\sigma_0 \otimes \tau_y \Psi_{x_n, y_n+1} e^{i\vartheta_n^{y}} + \Psi_n^{+}\sigma_z \otimes \tau_x \Psi_{x_n+1, y_n} e^{i\vartheta_n^{x}} - h.c.\right]$$

$$+ \sum_{n,\mu=x,y}\left[b\Psi_n^{+}\sigma_0 \otimes \tau_z \Psi_{n+\mu} e^{i\vartheta_n^{\mu}} + h.c.\right]$$

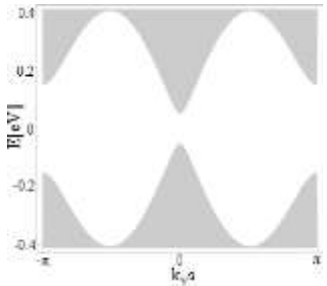


Ψ_n - оператор уничтожения электрона на n-ом узле

$$\tilde{H}(k_x, k_y) = \begin{pmatrix} \tilde{H}(k) & 0 \\ 0 & \tilde{H}^{*}(-k) \end{pmatrix}$$

$$\tilde{H}(k) = \begin{pmatrix} m + 2b\left(\cos(k_x) + \cos(k_y) - 2\right) & v\left(\sin(k_x) - i\sin(k_y)\right) \\ v\left(\sin(k_x) + i\sin(k_y)\right) & -m - 2b\left(\cos(k_x) + \cos(k_y) - 2\right) \end{pmatrix}$$

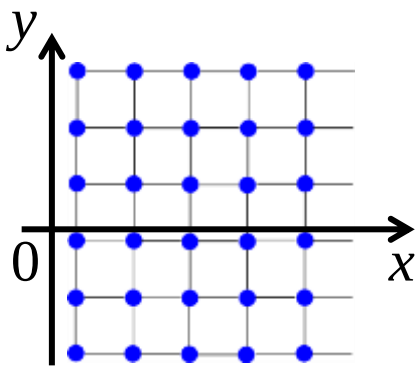
$$E = \pm\sqrt{\left(m + 2b\left(\cos(k_x) + \cos(k_y) - 2\right)\right)^2 + v^2\sin^2(k_y) + v^2\sin^2(k_x)} \xrightarrow{k \to 0} E = \pm\sqrt{(m - bk^2)^2 + v^2k^2}$$



Граничное условие в модели сильной связи

$$j_n^{\ x} = \left.\frac{\delta \tilde{H}}{\delta \vartheta_n^{\ x}}\right|_{\vartheta_n^{\ x}=0} = \left[ib\Psi_n^{\ +}\sigma_0 \otimes \tau_z \Psi_{x_n+1,y_n} - h.c.\right] + \frac{v}{2}\left(\Psi_n^{\ +}\sigma_z \otimes \tau_x \Psi_{x_n+1,y_n} + h.c.\right)$$

$$j_n^{\ x} = \left.\frac{\delta \tilde{H}}{\delta \theta_n^{\ x}}\right|_{\substack{\theta_n^{\ x}=0 \\ x_n=0}} = 0 \Rightarrow \begin{cases} \left(ib\sigma_0 \otimes \tau_z + \frac{v}{2}\sigma_z \otimes \tau_x \right)\psi_{1,y_n} = \tilde{G}\psi_{0,y_n} \\ \tilde{G} = \tilde{G}^+ \end{cases}$$



$\psi_{xn,yn}$ – волновая функция на n-ом узле

$$\begin{cases} T\tilde{G}T^{-1} = -\tilde{G} \\ I_y \tilde{G} I_y^{\ -1} = \tilde{G} \end{cases} = \tilde{G} = \begin{pmatrix} g_1 & g_2 & 0 & -ig_3 \\ g_2 & g_4 & -ig_3 & 0 \\ 0 & ig_3 & g_1 & -g_2 \\ ig_3 & 0 & -g_2 & g_4 \end{pmatrix}$$

g_1, g_2, g_3, g_4 – феноменологические граничные параметры

Краевые состояния 2D ТИ в модели сильной связи

Метод аналитического продолжения

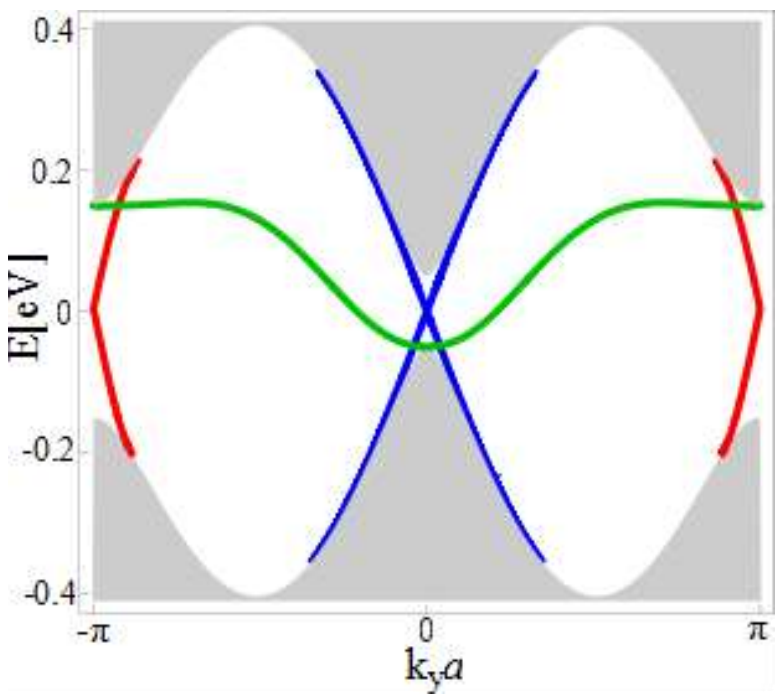
Объемный спектр H_{eff}: $E = \pm\sqrt{\left(m + 2b\left(\cos(k_x) + \cos(k_y) - 2\right)\right)^2 + v^2\sin^2(k_y) + v^2\sin^2(k_x)}$

$$\begin{cases} k_x = k + iq \\ \operatorname{Im} E = 0 \end{cases} \Rightarrow E = \pm\sqrt{\left(m + 2b\left(\pm\cosh(q_{1,2}) + \cos(k_y) - 2\right)\right)^2 + v^2\sin^2(k_y)} \Rightarrow \begin{matrix} q = q(E) \\ q > 0 \end{matrix}$$

$$\psi_n = \left(\vec{C}_1 e^{-q_1 x_n} + \vec{C}_2 e^{i\pi x_n - q_2 x_n}\right) e^{ik_y y} \Rightarrow \left(ib\sigma_0 \otimes \tau_z + \frac{v}{2}\sigma_z \otimes \tau_y\right)\psi_{1,y_n} = \tilde{G}\psi_{0,y_n}$$

$k_1 = 0$ $\quad$ $k_2 = \pi$

$$\tilde{G} = \begin{pmatrix} g_1 & g_2 & 0 & -ig_3 \\ g_2 & g_4 & -ig_3 & 0 \\ 0 & ig_3 & g_1 & -g_2 \\ ig_3 & 0 & -g_2 & g_4 \end{pmatrix}$$



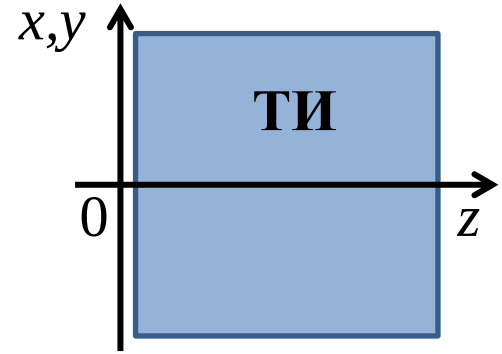
g1=g4=∞, g2=g3=0

g1=0.1, g2=0.5, g3=g4=0

g1 = -0.05, g4=∞, g2=g3=0

Поверхностные состояния в 3D ТИ Bi_2Se_3 в *kp*-приближении

$$H_{3D} = \begin{pmatrix} m - bk^2 & vk_z & 0 & vk_- \\ vk_z & -m + bk^2 & vk_- & 0 \\ 0 & vk_+ & m - bk^2 & -vk_z \\ vk_+ & 0 & -vk_z & -m + bk^2 \end{pmatrix}$$



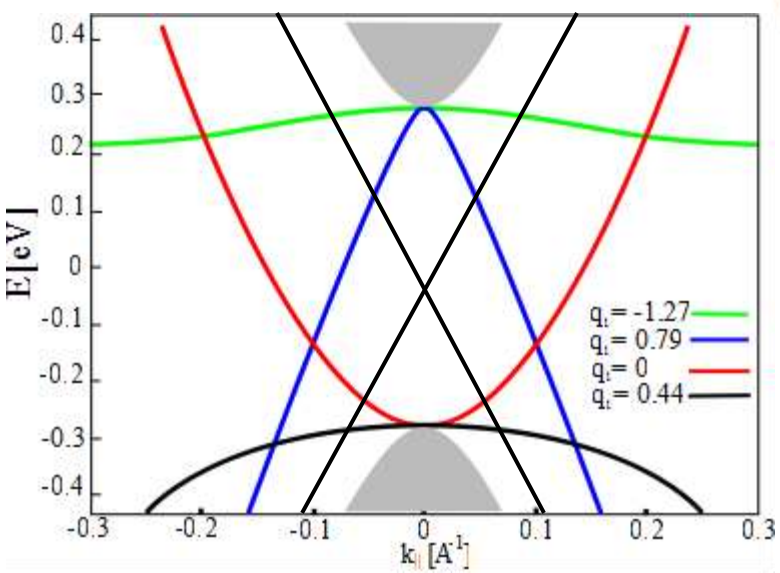
$$k_\pm = k_x \pm i k_y$$

$$< \psi \mid H_{3D} \mid \phi > = < \phi \mid H_{3D} \mid \psi >^*$$

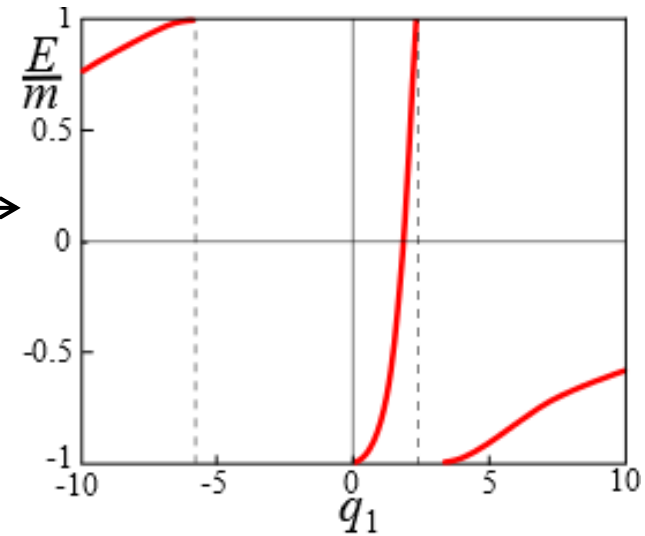
$$\left(\frac{b}{v} \partial_n \Psi - Q\Psi \right) \Big|_S = 0$$

$$T + R_{\varphi,z}$$

$$Q = \begin{pmatrix} q_1 & iq_2 + \frac{i}{2} & 0 & 0 \\ iq_2 - \frac{i}{2} & q_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & q_1 & -iq_2 - \frac{i}{2} \\ 0 & 0 & -iq_2 + \frac{i}{2} & q_3 \end{pmatrix}$$



$$q_3 = -q_1$$



$$k_x = k_y = 0$$

Выводы

•Спектр поверхностных/краевых состояний в топологических изоляторах сильно зависит от интерфейсового потенциала. Например, спектр ПС может совсем не иметь точки Дирака.

•В рамках ***kp***-приближения поверхностные/краевые состояния могут исчезать из запрещенной зоны топологического изолятора при изменении граничных параметров, феноменологически характеризующих потенциал интерфейса.

•В 2D модели сильной связи показано, что потенциал интерфейса не может нарушить соответствие объем-граница (bulk-boundary correspondence), задаваемое Z_2 инвариантом.

Спасибо за внимание