

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт
радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН

На правах рукописи



Еналдиев Владимир Викторович

**Свойства краевых и поверхностных состояний в
дираковских материалах**

01.04.10 – Физика полупроводников

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель

д. ф.-м. н.

Волков Владимир Александрович

Москва – 2017

Оглавление

Введение	4
Обзор литературы	11
1. Топологические и топологические кристаллические изоляторы	11
2. Эффект Ааронова-Бома в нанопроволоках топологических изоляторов	19
3. Краевые состояния в графене	21
Глава 1. Поверхностные состояния дираковских фермионов в полупроводниках типа Bi, $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$, $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x(\text{Se,Te})$	28
1.1. $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -гамильтониан в L долине $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x(\text{Se,Te})$, Bi и $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$	28
1.2. Граничное условие для анизотропного уравнения Дирака в ограниченном пространстве	35
1.3. Дираковские фермионы в нанопроволоке	39
1.4. Вклад в магнитопроводимость квантовой проволоки от поверхностных состояний	46
Глава 2. Граничные условия для волновой функции на поверхности топологического изолятора	50
2.1. Топологические изоляторы типа $\text{Bi}_2(\text{Se,Te})_3$	50
2.2. Двумерный топологический изолятор в модели сильной связи .	58
Глава 3. Краевые состояния в наноперфорированном графене . .	63
3.1. Спектр краевых состояний вблизи единичного nanoотверстия в графене	63
3.2. Поглощение циркулярно поляризованного излучения наноперфорированным графеном	66

Заключение	73
Список сокращений и условных обозначений	75
Список литературы	76
Приложение А. Спектры поверхностных состояний в сильном магнитном поле	86
Приложение Б. Плотность поверхностных состояний в дираковской нанопроволоке в магнитном поле	89

Введение

Актуальность темы исследования. Базовым элементом в современных электронных устройствах является полевой транзистор, каналом которого служит двумерный электронный газ, образующийся за счет изгиба зон в структуре металл-диэлектрик-полупроводник [1]. В настоящее время технологический прогресс привел к возможности создания и исследования физических свойств двумерного электронного газа с необычным дираковским законом дисперсии электронов, возникающим в ряде атомно тонких кристаллов и на поверхности трехмерных полупроводниковых кристаллов. Первым полученным в лаборатории кристаллом толщиной в один атом стал графен [2], который состоит из атомов углерода, расположенных в узлах гексагональной решетки. Главным отличительным свойством графена является ультрарелятивистский закон дисперсии носителей заряда, называемых также безмассовыми дираковскими фермионами. Существование безмассовых дираковских фермионов обуславливает необычные свойства графена (например, возможность наблюдения квантового эффекта Холла при комнатной температуре). С точки зрения применения графена в качестве материала в современных устройствах электроники и оптоэлектроники важно исследовать не только "объемные" свойства носителей заряда, но и свойства краевых/поверхностных состояний, возникающих из-за обрыва кристаллической решетки [3, 4]. Последние образуют дополнительный проводящий канал вблизи края графена [5] и влияют на транспортные и оптические свойства графеновых структур. Проявление вклада краевых состояний в оптическом поглощении графена с нанотверстиями изложено в отдельной главе настоящей диссертации.

Одновременно с исследованием графена возникла топологическая классификация полупроводниковых кристаллов [6]. В рамках этой теории классификация зон проводится согласно симметрии обращения времени и вводится понятие топологического инварианта – числа, принимающего два значения (0

или 1) и характеризующего объёмную зонную структуру полупроводника. Топологическими изоляторами (ТИ) называются полупроводники, для которых топологический инвариант равен 1 [7, 8]. Главным свойством ТИ является существование в запрещенной зоне материала топологически защищенных проводящих поверхностных состояний (ПС). К ТИ относят материалы Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , $\text{Bi}_x\text{Pb}_{1-x}$ (при $0.19 < x < 0.33$), в которых объёмные носители имеют дираковский (или модифицированный дираковский) закон дисперсии с ненулевой массой (шириной запрещенной зоны). В рамках метода огибающих функций для описания поверхностных состояний в ТИ используется нулевое граничное условие (ГУ) [9], которое гарантирует существование безмассовых дираковских фермионов на поверхности ТИ. Хотя интуитивно накладываемое нулевое ГУ является приемлемым, оно не может описать зависимость свойств ПС от возмущения кристаллического потенциала вблизи поверхности ТИ. Одна из глав диссертации содержит исследование зависимостей спектров ТИ от свойств поверхности в рамках феноменологического ГУ.

Помимо ТИ существуют топологические кристаллические изоляторы, существование ПС в которых защищено пространственной симметрией. К топологическим кристаллическим изоляторам относят сплавы $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x(\text{Se}, \text{Te})$. Объёмные носители в этих материалах также обладают дираковской дисперсией. Интересной особенностью указанных сплавов является существование ПС как при нормальном так и инвертированном порядке зон [10, 11]. В настоящей диссертации будет показано, что это естественно описывается в рамках уравнения Дирака, причем ПС в неинвертированной фазе приводят к эффектам похожим на те, что возникают из-за существования топологических ПС. Из вышеуказанного следует актуальность темы диссертационной работы.

Цели и задачи диссертационной работы: Построение теории поверхностных состояний в нанопроволоках дираковских материалов типа Bi , $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ и $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x(\text{Se}, \text{Te})$. Доказательство того, что нетопологические поверхностные состояния также дают ааронов-бомовский вклад в магнитопрово-

димось нанопроволоки. Исследование зависимости энергетического спектра поверхностных состояний от феноменологических граничных условий в топологических изоляторах типа $\text{Bi}_2(\text{Se},\text{Te})_3$ в рамках $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -приближения, а также двумерных топологических изоляторах в приближении сильной связи. Расчет вклада краевых состояний, локализованных на наноотверстиях, в поглощение наноперфорированного графена.

Для достижения поставленных целей были решены следующие задачи:

1. Нахождение энергетического спектра трехмерного изотропного уравнения Дирака в нанопроволоке без магнитного поля и в продольном магнитном поле. Вычисление вклада поверхностных состояний в магнитопроводимость нанопроволоки, при заполнении большого числа поверхностных подзон.
2. Вывод граничного условия для огибающих функций в трехмерных топологических изоляторах типа $\text{Bi}_2(\text{Se},\text{Te})_3$ на поверхности (111). Изучение зависимости энергетического спектра поверхностных состояний от значений параметров в выведенном граничном условии.
3. Вывод граничного условия для волновых функций в двумерных топологических изоляторах в рамках метода сильной связи с четырьмя орбиталями на каждом узле квадратной решетки. Исследование зависимости энергетических спектров краевых состояний по всей краевой зоне Бриллюэна от значений феноменологических параметров в выведенном ГУ.
4. Вычисление вклада внутрizonных переходов в поглощение наноперфорированного графена.

Научная новизна работы. В диссертации впервые найден энергетический спектр трехмерного уравнение Дирака с граничным условием, удовлетворяющим симметрии по отношению к инверсии времени и эрмитовости задачи, в геометрии нанопроволоки.

Предложено новое теоретическое описание ПС в 3D ТИ типа $\text{Bi}_2(\text{Se},\text{Te})_3$,

учитывающее пространственную симметрию поверхности (111). Рассмотрено влияние общего ГУ, инвариантного относительно инверсии времени, на спектр краевых состояний в 2D ТИ.

Предсказан новый механизм резонансного поглощения терагерцового излучения в наноперфорированном графене.

Практическая значимость. Предсказано, что наноперфорированный графен перспективен в качестве оптического модулятора терагерцового излучения.

Положения, выносимые на защиту:

1. Рассмотрен вклад нетопологических поверхностных состояний, образующих одномерные подзоны вне запрещенной зоны материала, в транспорт вдоль нанопроволок из дираковских кристаллов типа Bi , $Bi_{1-x}Sb_x$, $Pb_xSn_{1-x}(Se,Te)$. Включение продольного магнитного поля приводит к появлению осциллирующей ааронов-бомовской поправки к плотности поверхностных состояний и магнитопроводимости нанопроволоки.
2. В рамках приближения огибающих функций предложено общее граничное условие для 3D ТИ типа $Bi_2(Se,Te)_3$, удовлетворяющее общим физическим требованиям. Учет пространственных симметрий поверхности (111) кристаллов типа $Bi_2(Se,Te)_3$ позволяет уменьшить число неизвестных граничных параметров до трёх. Показано, что энергетический спектр топологических поверхностных состояний сильно зависит от значений граничных параметров и в общем случае не имеет стандартного конического вида.
3. В 2D ТИ, описываемых моделью сильной связи с четырьмя орбиталями на каждом узле двумерной квадратной решетки, общее граничное условие, инвариантное относительно обращения времени, не нарушает соответствие "объем-граница".
4. Предсказано, что коэффициент поглощения наноперфорированного гра-

фена имеет резонанс на частотах, соответствующих расстоянию между ближайшими уровнями энергий краевых состояний, локализованных вблизи каждого нанотверстия. Величиной коэффициента поглощения на резонансной частоте можно управлять при помощи напряжения на затворе.

Степень достоверности и апробация результатов. Достоверность представленных в диссертации результатов подтверждается тем, что при расчётах использовались проверенные методы теоретической физики, воспроизводящие результаты в предельных случаях и, дающих непротиворечивые результаты в различных подходах. Полученные теоретические результаты признаны научной общественностью при обсуждениях на российских и международных научных конференциях, а также подтверждены положительными рецензиями опубликованных статей в научных журналах.

Результаты исследований, вошедших в диссертацию, докладывались на Joint Conference of New Trends on Topological Insulators and 17-th International Conference on Narrow Gap Systems (Würzburg, Germany, July 25-29, 2016), Graphene Week 2016 (Warsaw, Poland, June 13-17, 2016), 18th and 22th International Symposium "Nanostructures: Physics and Technology" (Saint Petersburg, Russia, June 21-26, 2010, and Saint Petersburg, Russia, June 23-27, 2014); 10-ой и 12-ой Российской конференции по физике полупроводников (Нижний Новгород 19-23 сентября 2011 г., и Ершово 21-25 сентября 2015 г.); 18-ом международном симпозиуме "Нанопизика и нанопотоника" (Нижний Новгород, 10-14 марта 2014 г.); XIII Конференция молодых ученых "Проблемы физики твердого тела и высоких давлений" (Сочи, 10-21 сентября 2014); 9-th Advanced Research Workshop Fundamentals of Electronic Nanosystems "NanoPeter 2014" (Saint Petersburg, Russia, June 21-27, 2014); International Workshop "New Trends in Topological Insulators" (Berlin, Germany, 7-11 July 2014); 15-ой Школы молодых ученых "Актуальные проблемы физики" Физи-

ческий институт РАН, Москва, 16-20 ноября 2014 г.

Публикации. Материалы диссертации опубликованы в 13 печатных работах, из них 5 статей в рецензируемых журналах, входящих в систему Web of Science [12–16], а также 8 публикаций в сборниках трудов и тезисов конференций [17–24].

Личный вклад автора. Автор принимал участие в постановке задач и обсуждении результатов. Все расчеты проводились автором.

Структура диссертации. Диссертация состоит из введения, обзора литературы, 3-х глав, заключения, библиографии и 2-ух приложений. Работа содержит 90 страниц, включая 22 рисунка, 4 таблицы и список литературы из 111 источников.

Обзор литературы состоит из трёх разделов. В первом разделе Обзора вводится понятие топологического (кристаллического) изолятора и обзревается проблема граничных условий для огибающих функций трехмерных топологических изоляторов типа $\text{Bi}_2(\text{Se}, \text{Te})_3$, $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ и топологических кристаллических изоляторов типа $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x(\text{Se}, \text{Te})$. Второй раздел Обзора посвящен изложению известных теоретических и экспериментальных результатов по эффекту Ааронова-Бома в нанопроволоках из топологических изоляторов. В третьем разделе Обзора приводятся результаты работ по краевым состояниям в графене в модели сильной связи и в приближении огибающих функций и их связи с экспериментальными работами.

Первая глава содержит 4 раздела и посвящена проблеме поверхностных состояний в полупроводниках типа $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x(\text{Se}, \text{Te})$ и $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$. В разделе 1.1 методом инвариантов выводится двухзонный $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -гамильтониан, который приводится к виду анизотропного гамильтониана Дирака. Далее (раздел 1.2) обсуждается проблема граничного условия для анизотропного уравнения Дирака и вычисляются спектры поверхностных состояний для полупространства. Раздел 1.3 посвящен вычислению спектров изотропного уравнения Дирака в

нанопроволоке без магнитного поля и в продольном постоянном магнитном поле, а также вычислению плотности поверхностных состояний в магнитном поле. В заключительном разделе первой главы (раздел 1.4) вычисляется вклад поверхностных состояний в магнитопроводимость нанопроволоки.

Во **второй главе**, состоящей из двух разделов, исследуется проблема граничных условий для огибающих функций 3D ТИ (раздел 2.1) и для волновых функций электронов в 2D ТИ в рамках метода сильной связи (раздел 2.2).

Третья глава содержит два раздела и посвящена исследованию вклада краевых состояний в поглощение наноперфорированного графена. В разделе 3.1 вычисляется энергетический спектр краевых состояний, локализованных вблизи одного наноотверстия в графене. Затем в разделе 3.2 вычисляется вклад внутризонных переходов в коэффициент поглощения графена с многими наноотверстиями.

В **Заключении** сформулированы основные результаты работы.

Формулы и рисунки в диссертации нумеруются по главам в стиле №главы. №формулы (в Обзоре литературы №главы отсутствует), нумерация литературы и сокращения единые для всего текста. Список сокращений приведен после заключения, кроме того, в каждой главе при первом упоминании приводится расшифровка сокращения.

Обзор литературы

1. Топологические и топологические кристаллические изоляторы

1.1. Топологические изоляторы

Взгляд на зонную структуру полупроводников с точки зрения топологической классификации, по аналогии с топологическими соображениями, используемыми в теории квантового эффекта Холла [25], привёл к появлению нового физического понятия – топологический изолятор (ТИ) [7, 8]. ТИ называется полупроводниковый кристалл, в запрещенной зоне которого существуют топологически защищенные поверхностные состояния (ПС) металлического типа. Под топологической защитой здесь понимают то, что существование ПС определяется соображениями, основанными на топологической классификации объемных зон полупроводника и не зависит от деталей строения приповерхностной области. В идеальном случае в запрещенной зоне образуются однократно вырожденные расщепленные по спину поверхностные/краевые состояния, спектр которых схематически представлен на рис.1*d*. Спектр топологических ПС расщеплен по спиновому квантовому числу, что делает ТИ привлекательными для практических приложений в области спинтроники [26].

С топологической точки зрения ТИ отличается от обычного (тривиального) изолятора значением топологического инварианта Z_2 [6, 27], который характеризует топологические свойства заполненных зон полупроводника. Для ТИ значение топологического инварианта Z_2 равно единице ($\nu = 1$), в то время как для тривиального изолятора его значение равно нулю ($\nu = 0$). Здесь стоит отметить, что никакие возмущения гамильтониана кристалла, сохраняющие симметрию инверсии времени и не приводящие к закрытию запре-

щенной зоны, не могут поменять топологический класс полупроводника. Так как значение Z_2 -инварианта определяется с помощью матрицы, построенной на волновых функциях, а точнее блоховских множителях, всех заполненных зон бесконечного кристалла [27], то сама по себе топологическая классификация ничего не может сказать о ПС, появляющихся в результате обрыва кристаллического потенциала [3, 4]. Однако, принцип соответствия "объем-граница" ("bulk-boundary correspondence") утверждает, что в области изменения значения Z_2 -инварианта (т.е. на границе ТИ-вакуум или ТИ-тривиальный изолятор) уровень Ферми пересекает нечетное число пар (ферми дуг) ПС в запрещенной зоне 2D (3D) ТИ [7, 28]. ПС, возникающие на поверхности ТИ, называют топологическими, чтобы подчеркнуть их топологическое происхождение.

Теоретически было показано [9], что целый класс соединений с центром инверсии Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 являются ТИ. Оказалось, что именно учёт спин-орбитального взаимодействия в этих кристаллах приводит к инверсии двух ближайших к уровню Ферми зон с разной четностью, результатом чего является их нетривиальная топологическая классификация (см. рис.1). Существование топологических ПС в кристаллах Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 было подтверждено в экспериментах по фотоспектроскопии с угловым и спиновым разрешением [29, 30].

В приближении огибающих волновых функций в окрестности центра зоны Бриллюэна (Γ -точки) электроны и дырки в соединениях типа Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 описываются уравнением Дирака [9]:

$$\begin{pmatrix} m(\mathbf{p}) & vp_z & 0 & vp_- \\ vp_z & -m(\mathbf{p}) & vp_- & 0 \\ 0 & vp_+ & m(\mathbf{p}) & -vp_z \\ vp_+ & 0 & -vp_z & -m(\mathbf{p}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix}, \quad (1)$$

в котором мы пренебрегли анизотропией, $m(\mathbf{p}) = m + b\mathbf{p}^2$ – массовый член,

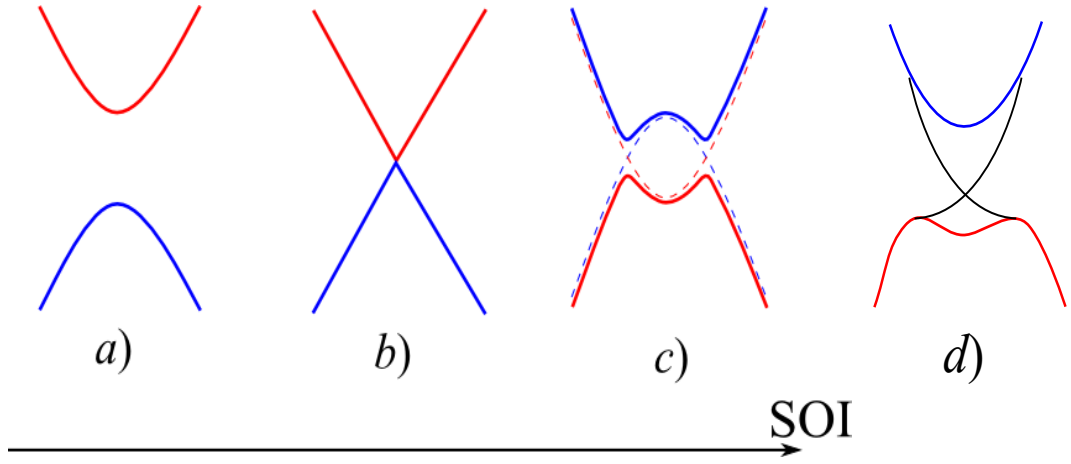


Рис. 1. Схема эволюции объемного спектра узкощелевого кристалла при увеличении объемного спин-орбитального взаимодействия, приводящего к инверсии зон: от фазы тривиального изолятора (a) через бесщелевую фазу (b) до инвертированного спектра в фазе топологического изолятора (c). Панель (d): зонная модель полубесконечного топологического изолятора типа Bi_2Se_3 . В кривизну спектра объемных зон вносит вклад дисперсия массового члена $m(\mathbf{k})$ в гамильтониане (1). Черные кривые изображают спектр топологических ПС. Рисунок адаптирован из работы [16].

зависящий от квазиимпульса, $p_{\pm} = p_x \pm p_y$, v – матричный элемент оператора скорости в Γ -точке, $\Psi = (\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \Psi_4)^T$ – столбец из огибающих волновых функций. Уравнение (1) выведено в системе координат, в которой ось z совпадает с направлением (111) ромбоэдрической решетки кристаллов Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 . Для нахождения волновых функций и спектра топологических ПС в рамках уравнения (1) необходимо задать граничное условие (ГУ) для огибающих функций на поверхности кристалла. В подавляющем большинстве работ используется нулевое ГУ для всех компонент Ψ [9, 31–38]. В топологической фазе, т.е. при $mb < 0$ [9, 31], нулевое ГУ обеспечивает появление ПС с бесщелевым дираковским спектром:

$$E = \pm v \sqrt{p_x^2 + p_y^2}. \quad (2)$$

Однако, топологические ПС оказываются чувствительными к различного рода возмущениям приповерхностного потенциала, таким как окисление поверхности [39], осаждение на поверхность магнитных и немагнитных атомов

[40–43], покрытие поверхности слоями других материалов [44, 45]. Поэтому описание различного рода возмущений на поверхности ТИ в рамках уравнения (1) требует ГУ более общего вида. Используя вариационный принцип, в работе [46] было выведено следующее ГУ (на поверхности (111)):

$$[\hat{v}_z - U] \Psi|_{z=0} = 0, \quad (3)$$

в котором $\hat{v}_z = \partial H / \partial k_z$ – z -компонента оператора скорости гамильтониана ТИ, стоящего в левой части уравнения (1), U – матрица поверхностного потенциала размера 4×4 , описывающая влияние возмущений вблизи поверхности ТИ на электронные состояния (как поверхностные, так и объемные). Авторы рассмотрели диагональный вид матрицы поверхностного потенциала $U = \text{diag}\{U_1, U_2, U_1, U_2\}$. В случае $U_1 = U_2$ было показано, что положение конической точки (называемой также дираковской) в спектре топологических ПС зависит от значений потенциала U_1 (см.рис. 2), а также, что в определенной области параметров коническая точка может попадать в область объемных состояний. Диагональную матрицу U можно интерпретировать как изгиб зон, вызванный встроенным электрическим потенциалом на границе. В случае псевдоэлектрического поля $U_1 = -U_2$, спектр топологических ПС имеет вид (2) при любых значениях U_1 .

1.2. Топологические кристаллические изоляторы

Развитие идей топологической классификации зонной структуры полупроводников, связанных с существованием как симметрии инверсии времени, так и пространственных симметрий у высокоиндексных поверхностней, привело к возникновению топологических кристаллических изоляторов (ТКИ) [47].

Кристаллические соединения $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}(\text{Se})$ переходят в фазу ТКИ при определённых значениях концентрации олова ($x > 0.2$), когда происходит инверсия зон разной четности в точках L [48, 49]. В фазе ТКИ на поверхностях

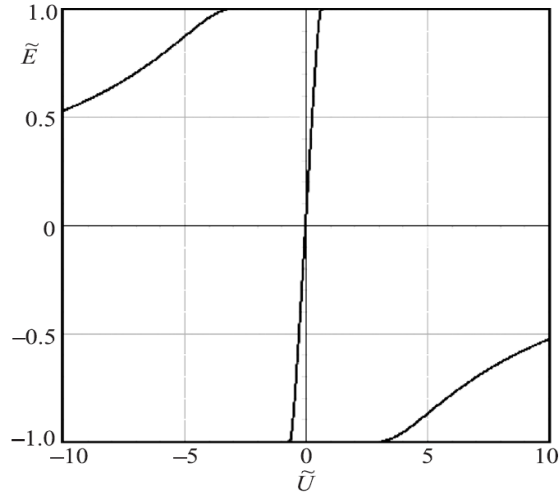


Рис. 2. Зависимость положения дираковской точки в спектре топологических ПС от значения $\tilde{U} = U_1/\sqrt{mb}$ для диагональной матрицы $U = U_1 \text{diag}\{1, 1, 1, 1\}$, из работы [46].

$\{001\}$, $\{110\}$, $\{111\}$ возникает четное число безмассовых дираковских фермионов, существование которых защищено плоскостями зеркальной симметрии [11, 50, 51].

В литературе распространен подход к рассмотрению топологических ПС в ТКИ [49] (и ТИ [52]), связанный с формулировкой моделей с плавно меняющимися (на атомных масштабах) зонными параметрами вблизи интерфейса. Такой подход основан на работе [53], в которой рассмотрен симметричный инверсионный гетерокontakt, возникающий за счет плавного изменения состава в соединениях $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}(\text{Se})$. В двухзонном приближении электроны в L -долинах $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}(\text{Se})$ описываются уравнением Дирака [54, 55] с массой, изменяющей знак вблизи интерфейса (см. рис.3а):

$$\begin{pmatrix} -E & im(z) + v\sigma p \\ -im(z) + v\sigma p & -E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_c \\ \Psi_v \end{pmatrix} = 0 \quad (4)$$

Вблизи точки инверсии массы (запрещенной зоны) возникает 2D зона ПС со спектром бесщелевых дираковских фермионов (2). Их волновая функ-

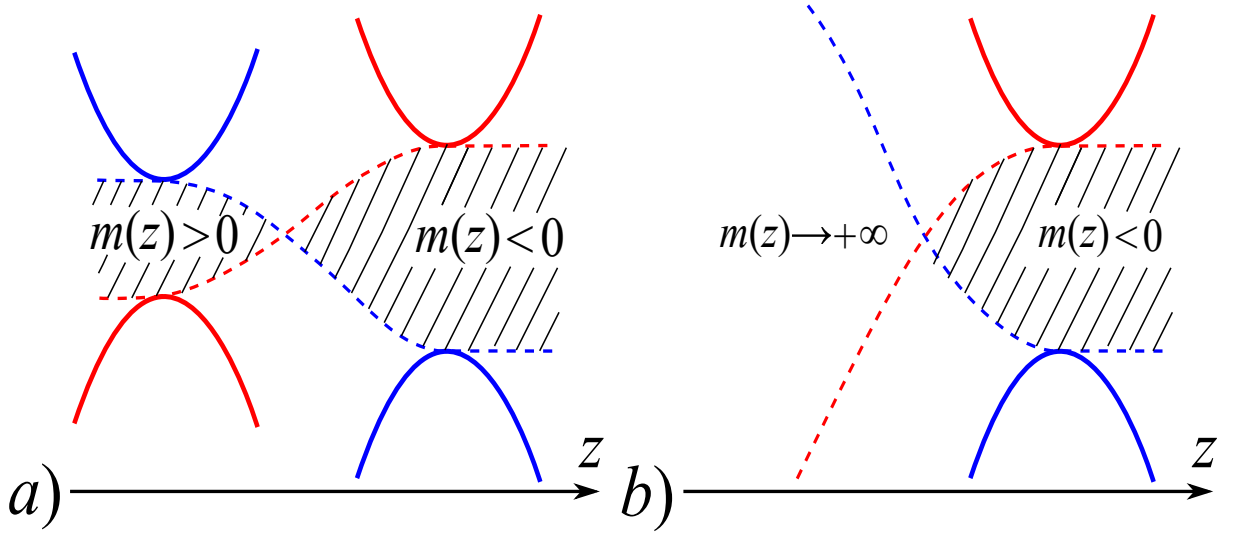


Рис. 3. *a)* Модель симметричного инверсионного гетероконтакта. *b)* Модель ТКИ и ТИ, используемая в работах [49, 52]

ция локализована в плоскости интерфейса:

$$\Psi_{\pm} = \begin{pmatrix} 0 \\ e^{i\theta/2} \\ e^{-i\theta/2} \\ 0 \end{pmatrix} e^{\int_0^z \frac{m(z)}{\hbar v} dz + i(k_x x + k_y y)}, \quad (5)$$

здесь $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$, $e^{i\theta} = (k_x + ik_y) / \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$.

Пользуясь топологической терминологией, можно сказать, что существование состояний (5) со спектром безщелевых дираковских фермионов (2) защищено инверсией запрещенной зоны при удалении от области контакта. Решения уравнения Дирака вида (5) тесно связаны с нулевыми модами суперсимметричной квантовой механики [56, 57].

Более реалистична модель несимметричного контакта, рассмотренная в обзоре [58], рис.4. Асимметрия зон задается скалярным потенциалом $\varphi(z)$, имеющим смысл интерфейсного изгиба зон. С учетом разрыва зон спектр интерфейсных состояний имеет вид:

$$E = \frac{m_1 \varphi_0}{m_0} \pm v \sqrt{1 - \left(\frac{\varphi_0}{m_0}\right)^2} \sqrt{p_x^2 + p_y^2}, \quad (6)$$

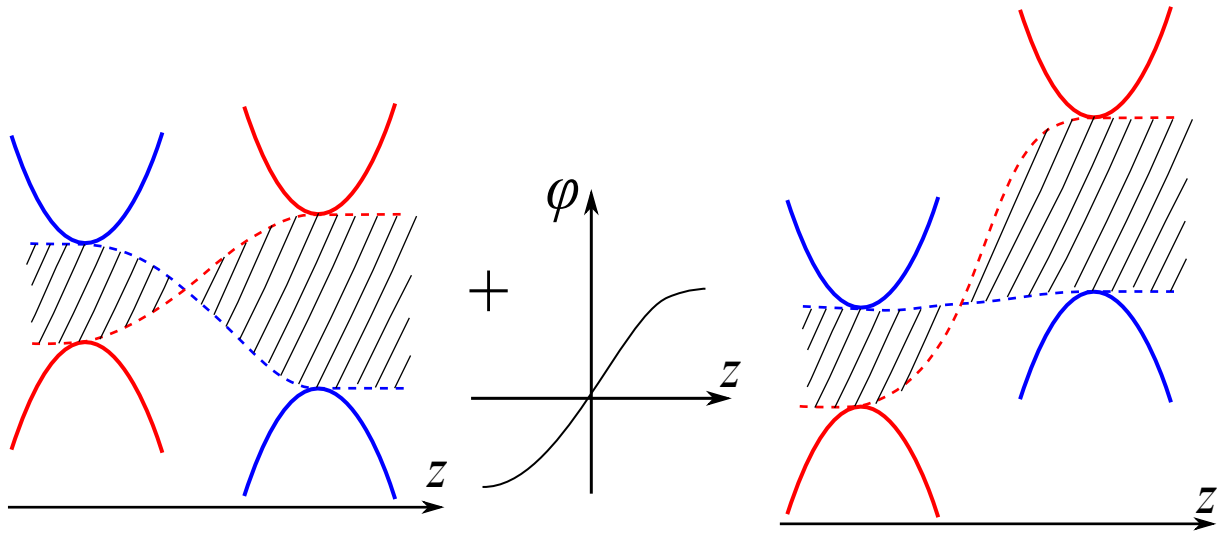


Рис. 4. Несимметричный инверсионный гетерокontakt [58]. При большом рассогласовании работ выхода интерфейсные состояния перестают существовать, несмотря на инверсию зон. Рисунок адаптирован из работы [16]

где $\varphi(z) = \varphi_0 f(z)$, $m(z) = m_0 f(z) + m_1$, модельная функция $f(z)$ описывает согласованное изменение ширины запрещенной зоны и изгиба зон на гетероинтерфейсе. Из формулы (6) видно, что если изменение потенциала превосходит полуширину запрещенной зоны (т.е. $\varphi_0/m_0 > 1$), то интерфейсные состояния не возникают. Отсюда следует, что инверсии массы недостаточно для появления интерфейсных состояний.

Для описания топологических ПС в рамках уравнения Дирака (4) необходимо постулировать, что ширина запрещенной зоны $m(z)$ вне кристалла (т.е. в вакууме) имеет бесконечно большое положительное значение, а внутри кристалла в топологической фазе – отрицательное значение [49, 52] (см. рис.3b). Тогда на поверхности кристалла неизбежно возникают ПС с бесщелевым дираковским спектром (2). В таком подходе инверсия ширины запрещенной зоны связывается с изменением топологического инварианта при переходе из ТИ (ТКИ) в вакуум, считающийся тривиальным по определению. Однако при движении вдоль нормали к поверхности кристалла изменение знака ширины запрещенной зоны происходит резко на атомных масштабах, и, поэтому, рассматриваемая модель, вообще говоря, выходит за рамки приближения оги-

бающих функций. Чтобы корректно учесть поверхность в $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -приближении, нужно задать на поверхности кристалла граничное условие для огибающих функций, параметры которого феноменологически описывают свойства переходной области кристалл-вакуум. Впервые такое ГУ для уравнения Дирака (4) было получено в работе [59]:

$$[\Psi_c - ia_0\boldsymbol{\sigma}\mathbf{n}\Psi_v]_S = 0, \quad (7)$$

здесь действительный феноменологический параметр a_0 описывает строение поверхности и запутывание объемных зон из-за обрыва кристаллического потенциала. ГУ (7) приводит к бесщелевому дираковскому спектру ПС (рис.5):

$$E = \pm \frac{2a_0v}{1+a_0^2} \sqrt{p_x^2 + p_y^2} + m \frac{1-a_0^2}{1+a_0^2}, \quad (8)$$

применимому при условии

$$\frac{2a_0}{1+a_0^2} \frac{m}{\hbar v} \mp \frac{1-a_0^2}{1+a_0^2} \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \geq 0 \quad (9)$$

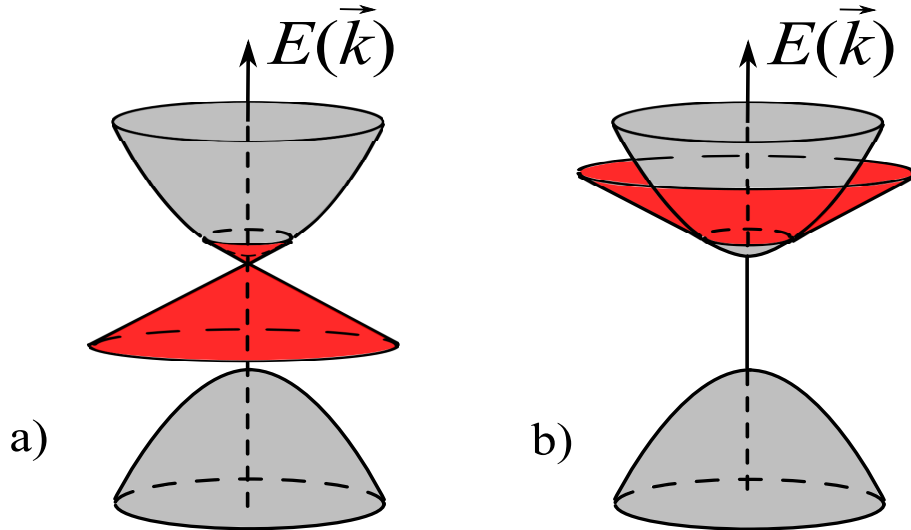


Рис. 5. Энергетический спектр 3D уравнения Дирака на полупространстве. Красным цветом показана зона однократно вырожденных поверхностных состояний, серым цветом отмечены объемные состояния. На рис (a) параметр $a_0 > 0$, (b) – $a_0 < 0$. Рисунок адаптирован из работы [16].

Следствием условия существования ПС (9) является два различных типа спектра ПС. При положительных значениях параметра a_0 , энергии ПС пересекают запрещенную зону дираковского материала (рис.5а), как и топологические ПС (2). Поэтому далее в настоящей диссертации ПС при $a_0 > 0$ мы также будем называть ПС топологического типа, подразумевая указанное сходство спектров. При отрицательных значениях параметра a_0 энергии ПС лежат на фоне разрешенных состояний и не пересекают запрещенную зону (рис.5b).

Интересно сравнить результаты работ [58] и [59]. Спектр интерфейсных состояний (6) переходит в спектр ПС (8) при замене

$$a_0 = -\text{sgn}(m_0) \sqrt{\frac{m_0 - \varphi_0}{m_0 + \varphi_0}} \quad (10)$$

Отсюда виден физический смысл граничного параметра a_0 : его знак коррелирует со знаком ширины запрещенной зоны, а отличие его амплитуды от 1 есть мера электрон-дырочной асимметрии в системе.

2. Эффект Ааронова-Бома в нанопроволоках топологических изоляторов

Наблюдение осцилляций Ааронова-Бома в магнитосопротивлении нанопроволок из топологических изоляторов является одним из доказательств существования проводящих топологических поверхностных состояний. В силу прижатости ПС к поверхности нанопроволоки, последняя образует систему, похожую на полый металлический цилиндр. Известно два механизма, порождающие осциллирующий по магнитному потоку вклад в магнитосопротивление полого металлического цилиндра при приложении продольного магнитного поля. Первый реализуется в диффузионном транспортном режиме (длина свободного пробега электрона меньше длины цилиндра) и носит название осцилляций Альтшулера-Аронова-Спивака [60], период которых $\Phi_0/2$

($\Phi_0 = hc/e$). Осцилляции Альтшулера-Ааронова-Спивака возникают благодаря интерференционному вкладу двух замкнутых траекторий электронов, движущихся по и против часовой стрелки по поверхности нанопроволоки. Второй механизм реализуется в чистых нанопроволоках (длина свободного пробега намного превышает длину нанопроволоки) и возникает благодаря квантовым поправкам к плотности состояний из-за периметрического квантования движения электронов [61, 62]. Этот механизм приводит к осциллирующим поправкам в магнитосопротивлении нанопроволоки, с главным периодом Φ_0 .

Свойства ПС в ТИ типа Bi_2Se_3 обычно описываются в модели эффективного двумерного уравнения Вейля [9, 31, 63–72]

$$v\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}\psi = E\psi, \quad (11)$$

здесь $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ – вектор спиновых матриц Паули (необязательно в стандартном представлении), $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$ – квазиимпульс электрона в плоскости поверхности ТИ. В работе [63] исследовалась зависимость периодичности и величины вклада ПС в осцилляции Ааронова-Бома нанопроволоки из ТИ от силы потенциала примесей $V(\mathbf{r})$ при разных уровнях заполнения поверхностной зоны. Примесный потенциал задавался гауссовой корреляционной функцией:

$$\langle V(\mathbf{r})V(\mathbf{r}') \rangle = K_0 \frac{(\hbar v)^2}{2\pi\xi^2} e^{-\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2}{2\xi^2}}, \quad (12)$$

в которой K_0 – безразмерная сила потенциала примесей, ξ – корреляционная длина. Для описания ПС на цилиндрической поверхности нанопроволоки в рамках уравнения (11) необходимо наложить на волновые функции ψ периодическое ГУ по координате вдоль окружности:

$$\psi(x, y + W) = e^{i\pi + i2\pi\Phi/\Phi_0} \psi(x, y), \quad (13)$$

здесь W – длина окружности нанопроволоки, π – дополнительная фаза, возникающая из-за поворота частицы со спином $1/2$ на угол 2π , Φ – ве-

личина магнитного потока, проходящего через сечение нанопроволоки. Результаты численного моделирования представлены на рис.6. При достаточно большой силе потенциала примесей и относительно большом заполнении поверхностной зоны реализуется диффузионный механизм транспорта, при котором кондактанс проволоки осциллирует с периодом $\Phi_0/2$ [60] (т.е. значения кондактанса при $\Phi/\Phi_0 = 0$ и $\Phi/\Phi_0 = 1/2$ равны на рис.6). При маленьких K_0 и относительно большом заполнении ПС осцилляции кондактанса происходят с периодом Φ_0 . Причем положение максимумов зависит от значения уровня Ферми, что отвечает осцилляциям плотности ПС из-за периметрического квантования. Когда уровень Ферми лежит в окрестности дираковской точки, осцилляции с периодом Φ_0 определяются возникновением двух подзон с линейной дисперсией. В силу дополнительной фазы π при периметрическом квантовании и отсутствия рассеяния назад между состояниями линейных подзон, максимальное значение кондактанса, равное e^2/h , не зависит от величины потенциала примесей и достигается при полуцелых значениях Φ/Φ_0 .

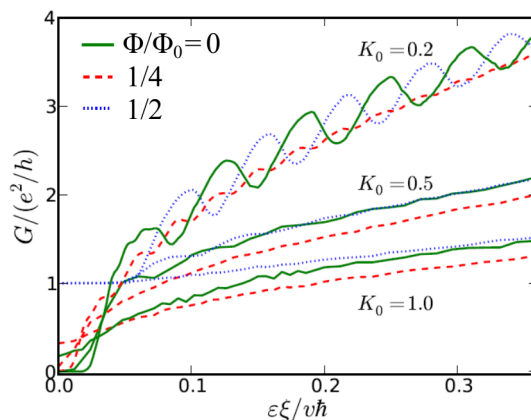


Рис. 6. Кондактанс нанопроволоки из топологического изолятора как функция энергии Ферми ε при разных значениях силы беспорядка K_0 и трех величин магнитного потока Φ . Численные расчеты проводились при $W = 100\xi$, $L = 200\xi$. Рисунок адаптирован из работы [63].

В работах [73, 74] была продемонстрирована периодическая зависимость

магнитосопротивления в нанопроволоках Bi_2Se_3 и Bi_2Te_3 . Главный период осцилляций соответствовал прохождению целого числа квантов магнитного потока Φ_0 через сечение нанопроволоки. Подавленность периода $\Phi_0/2$ указывает, видимо, на хорошее качество выращенных нанопроволок.

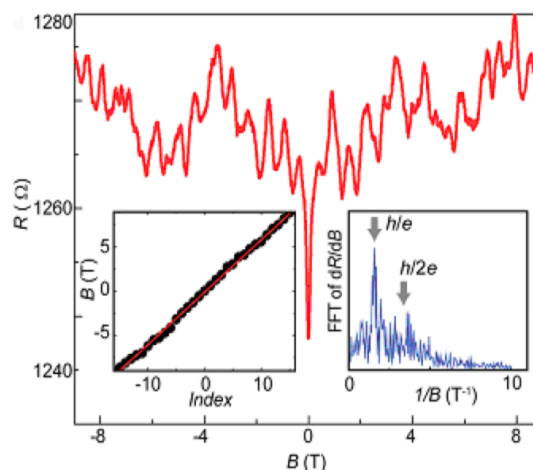


Рис. 7. Магнитосопротивление нанопроволоки из топологического изолятора Bi_2Se_3 из работы [73].

3. Краевые состояния в графене

Графен представляет собой двумерный кристалл, составленный из атомов углерода, расположенных в узлах треугольной решетки Браве с двумя атомами в элементарной ячейке (см. рис.8а). Плоская тригональная решетка графена (с расстоянием между атомами равным 0.142 нм. и постоянной решетки – 0.246 нм) возникает благодаря sp^2 гибридизации атомов углерода, сцепленных σ -связями. Оставшиеся полузаполненными p_z -орбитали атомов углерода, отвечают за проводящие свойства графена [75]. Первая зона Бриллюэна представляет собой гексагон (рис.8б). Расчёты в рамках метода сильной связи с учётом одной p_z -орбитали для каждого атома углерода показали [76], что графен является полуметаллом, причем валентная зона и зона проводимости касаются друг друга на границе зоны Бриллюэна в точках

K, K' . Вблизи K, K' точек (называемыми K, K' долинами) электроны обладают линейным законом дисперсии. В приближении огибающих функций динамика электронов в K, K' долинах эффективно описывается уравнением Вейля-Дирака [77]:

$$\begin{pmatrix} v\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p} & 0 \\ 0 & v\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_K \\ \Psi_{K'} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \Psi_K \\ \Psi_{K'} \end{pmatrix} \quad (14)$$

здесь $v \approx 10^6 \text{ см/с}$, $\mathbf{p} = (p_x, p_y, 0)$ – квазиимпульс электрона в плоскости графена, отсчитанный от точек K или K' , $\Psi_{K, K'}$ – двухкомпонентная огибающая функция в соответствующей долине, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ – вектор из матриц Паули в стандартном представлении.

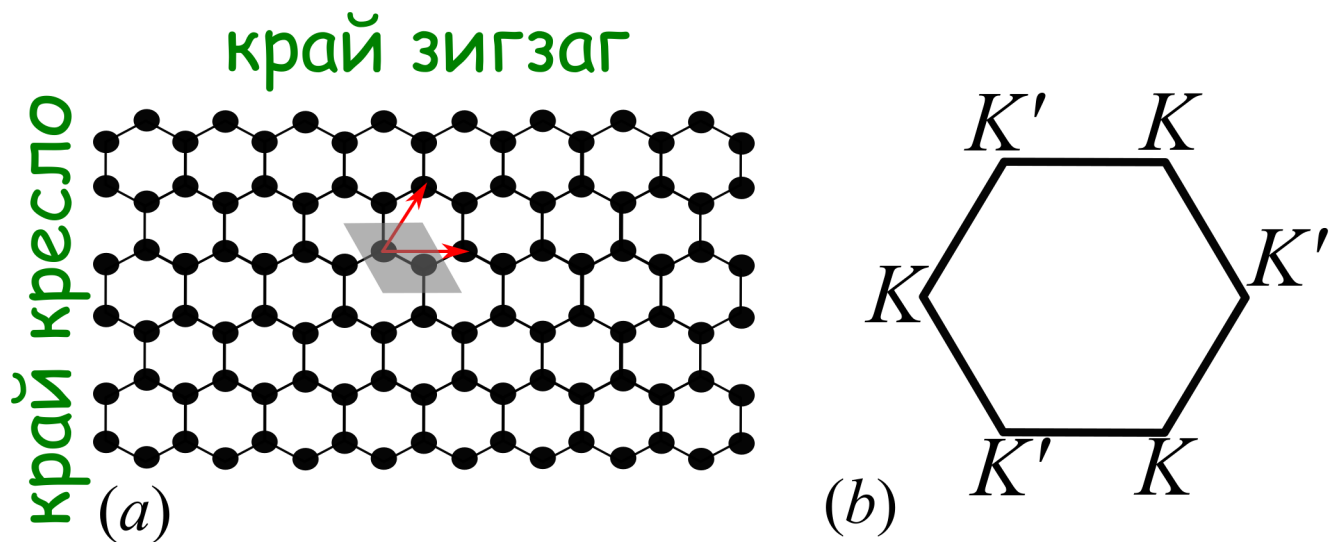


Рис. 8. (a) Прямая решетка графена. Серым цветом закрашена элементарная ячейка с двумя атомами углерода, красные стрелки обозначают вектора трансляций треугольной решетки Браве. (b) Первая зона Бриллюэна графена. K, K' обозначены точки касания валентной зоны и зоны проводимости, вблизи которых электроны описываются уравнением Вейля-Дирака (14).

Для рассмотрения краевых состояний в ограниченном графене в рамках уравнения (14) необходимо задать ГУ для огибающей функции $\Psi = (\Psi_K, \Psi_{K'})$. Так как на краю графена кристаллический потенциал обрывается на атомных масштабах, то общее ГУ, вообще говоря, запутывает волновые

функции двух долин. Наиболее общее ГУ на краю графена, предложенное в работе [78], записывается в виде:

$$[1 - M] \Psi|_S = 0 \quad (15)$$

где эрмитова матрица M размера 4×4 описывает краевой кристаллический потенциал, аналогично ГУ в ТИ (3) или ГУ для уравнения Дирака (7), и удовлетворяет условиям:

$$M^2 = 1; \quad M\sigma_0 \otimes \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} + \sigma_0 \otimes \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} M = 0, \quad (16)$$

где σ_0 – единичная матрица 2×2 , действующая в пространстве долин, \mathbf{n} – единичный вектор нормали к границе. Матрицу M , удовлетворяющую условиям (16), можно представить в виде [79]:

$$M = \sin(\Lambda) \sigma_0 \otimes \boldsymbol{\sigma} \mathbf{m}_1 + \cos(\Lambda) (\boldsymbol{\nu} \boldsymbol{\sigma}) \otimes (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{m}_2), \quad (17)$$

где $\boldsymbol{\nu}$, $\mathbf{m}_{1,2}$ – единичные вектора в трехмерном пространстве, $\mathbf{m}_1 \perp \mathbf{m}_2$, $\mathbf{m}_{1,2} \perp \mathbf{n}$. Дополнительное требование сохранения симметрии инверсии времени на границе удовлетворяется только если $\Lambda = 0$ [79]. Таким образом с учетом симметрии инверсии времени общее ГУ содержит три параметра (два задают единичный вектор $\boldsymbol{\nu}$ и ещё один вектор \mathbf{m}_2).

Считается [81, 82], что край типа зигзаг описывается матрицей M с параметрами $\boldsymbol{\nu} = \pm \hat{z}$, $\mathbf{m}_2 = \hat{z}$, так как такой выбор значений параметров приводит к существованию бездисперсионных краевых состояний с нулевой энергией (отсчитанной от дираковской точки), что согласуется с расчетами в модели сильной связи в приближении ближайших соседей [80, 83] (см. рис.9a). Однако, при учете следующих за ближайшими соседями на краю типа зигзаг, краевые состояния приобретают линейную дисперсию вблизи каждой из долин [5] (рис.10a). Позже в ряде работ [84–87] было выведено наиболее общее ГУ в приближении не запутывающихся долин на краю:

$$[\psi_{1,\tau} + i\tau a^\tau e^{-i\varphi} \psi_{2,\tau}]_{\text{at edge}} = 0, \quad (18)$$

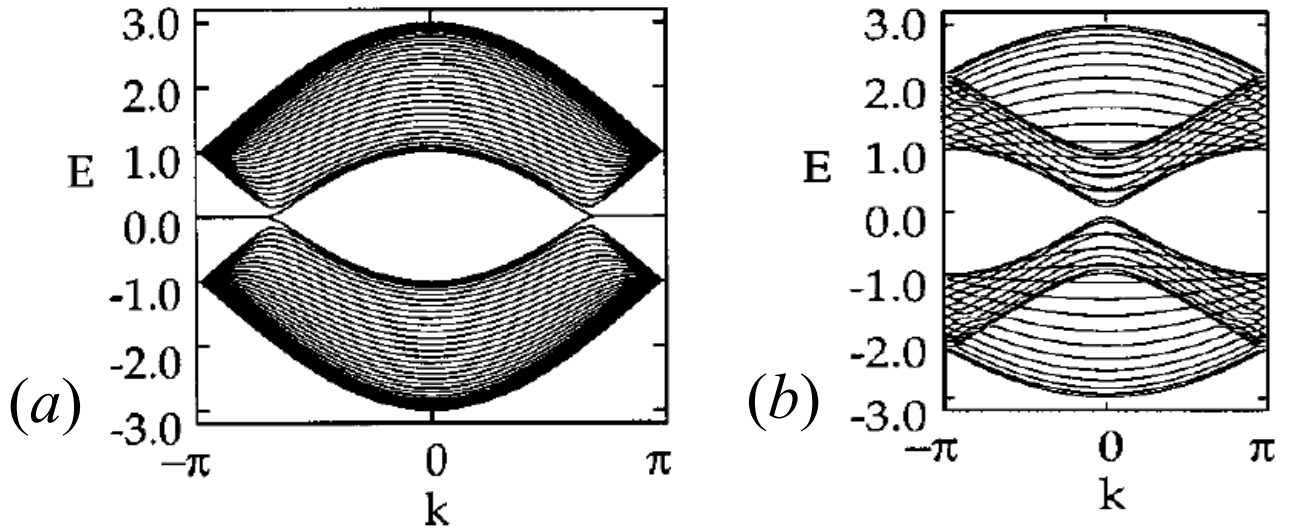


Рис. 9. Спектр состояний в графеновой нанополосе с краем типа зигзаг (a) и кресло (b) в приближении ближайших соседей метода сильной связи. Из работы [80].

где $\tau = 1(-1)$ – индекс долины $K(K')$ соответственно, $\Psi_{K(K')} = (\psi_{1\tau}, \psi_{2\tau})$, φ – угол между нормалью к краю и осью \hat{x} , a – феноменологический действительный параметр, описывающий свойства края. ГУ (18) применимо для любого трансляционно инвариантного края, проекции долин на который разнесены в обратном пространстве на расстояния порядка обратной постоянной решетки (край типа зигзаг и его реконструкции попадают в эту категорию). Отличие параметра a от 0 (или ∞) приводит к появлению КС с линейной дисперсией, начинающихся в центрах каждой из долин (см. рис.10b, c). Спектр, полученный с использованием однодолинного ГУ (18) в приближении огибающих функций, согласуется со спектрами, полученными в методе сильной связи для края типа зигзаг при учете интегралов перекрытия со следующими за ближайшими соседями [5] или его реконструкциях в приближении ближайших соседей [87].

Без модификации интегралов перекрытия в модели сильной связи в приближении ближайших соседей край типа кресло не поддерживает краевых состояний [80, 82, 83] (рис.9b). Проекции долин K и K' на край типа кресло совпадают, поэтому для этого типа края в приближении огибающих выбира-

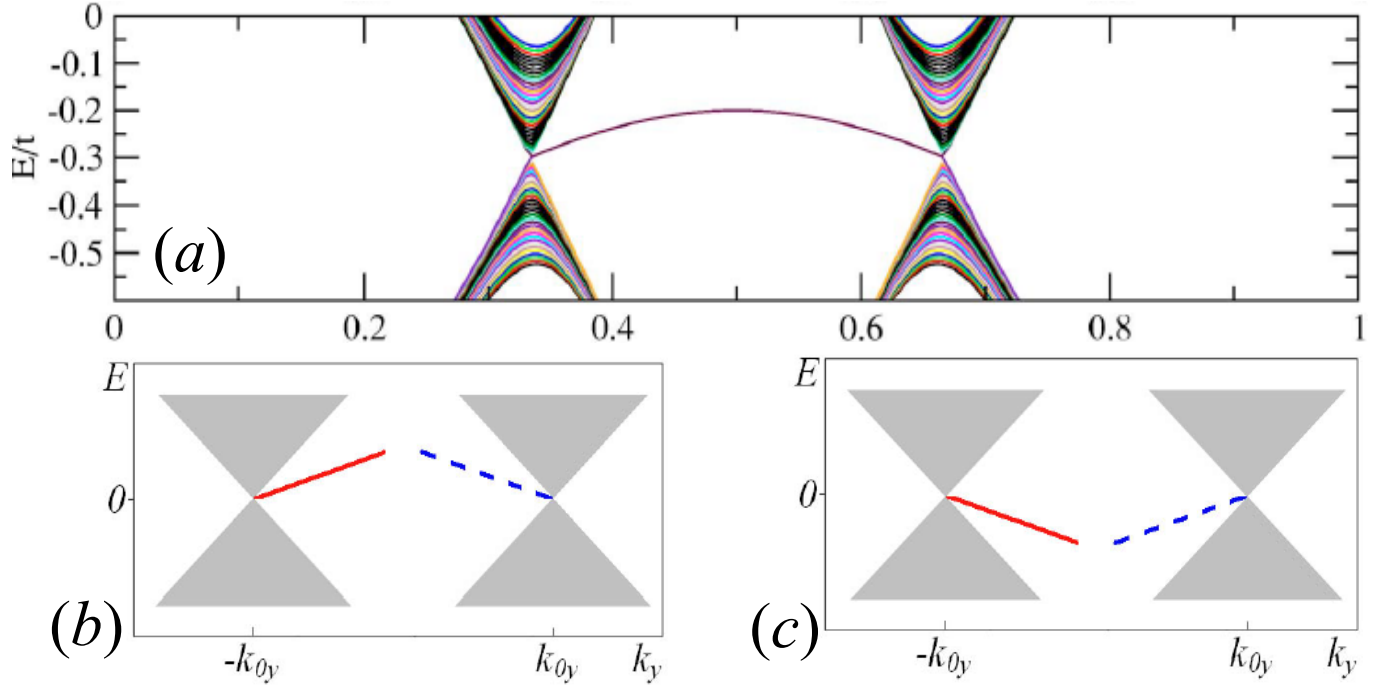


Рис. 10. (a) Спектр состояний в графеновой нанополосе с краем типа зигзаг, полученный в рамках метода сильной связи при отношении интегралов перекрытия следующих за ближайшими соседями к ближайшим соседям равно -0.1 [5]. (b) Спектр краевых состояний в приближении огибающих функций с использованием ГУ (18) при $0 < a < 1$, (c) – при $-1 < a < 0$ [88].

ется запутывающее долины ГУ (15,17) с $\nu = \hat{x}$, $m_{2z} = 0$, которое ”обеспечивает” отсутствие краевых состояний. С другой стороны в работах [89, 90] было показано, что определенная модификация интегралов перекрытия ближайших соседей на краю типа кресло в приближении ближайших соседей модели сильной связи приводит к появлению диспергирующих краевых состояний.

В работе [91] в рамках метода сильной связи было показано, что краевые состояния устойчивы к беспорядку на краю графеновой квантовой точки (см. рис.11).

Краевые состояния наблюдались локально методом сканирующей туннельной спектроскопии вблизи краев типа зигзаг в графеновых нанополосках и квантовых точках [92, 93]. Комбинацией туннельной спектроскопии и транспортных измерений было показано [94], что краевые состояния да-

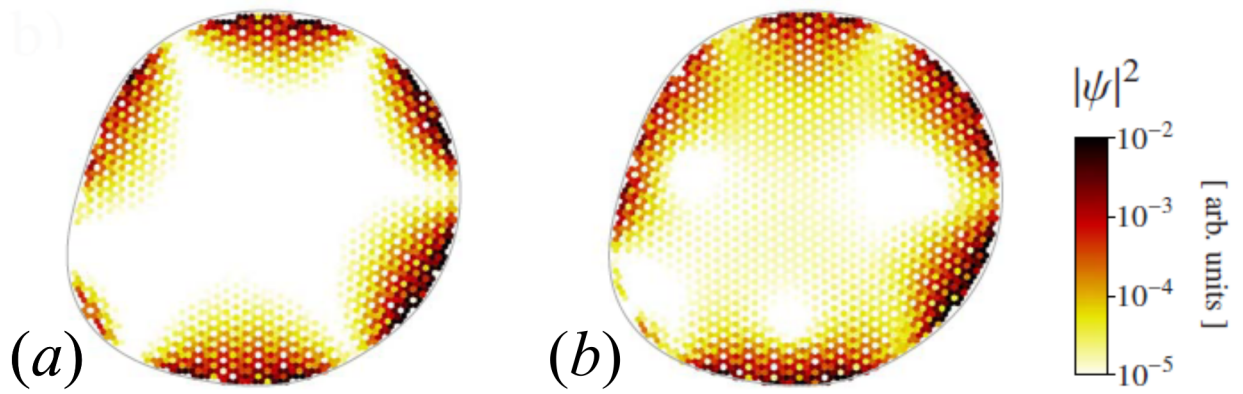


Рис. 11. Амплитуда волновой функции краевого состояния на неупорядоченном краю графеновой точки в приближении ближайших соседей (a) и с учетом следующих за ближайшими соседями (b) метода сильной связи (при отношении интегралов перекрытия как и на рис.10(a)). Из работы [91].

ют баллистический вклад в проводимость (e^2/\hbar) графеновых нанополосок (предположительно с краем типа зигзаг), выращенных на боковых стенках траншей глубиной 20нм на поверхности SiC. Возникновение пиков на зависимости сопротивления наноперфорированного графена от напряжения на затворе указывает на существование дискретных краевых состояний вокруг каждого их нанотверстий [95]. Последняя работа стала мотивацией для главы 3, в которой исследован вклад в отклик наноперфорированного графена, связанный с существованием краевых состояний.

Глава 1

Поверхностные состояния дираковских фермионов в полупроводниках типа Bi , $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$, $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x(\text{Se}, \text{Te})$

В этой главе исследуются свойства поверхностных состояний дираковских фермионов в материалах типа Bi , $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$, $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x(\text{Se}, \text{Te})$ в приближении огибающих функций. В разделе (1.1) выводится $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -гамильтониан, описывающий зонную структуру в L долине узкощелевых полупроводников типа $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x(\text{Se}, \text{Te})$, $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$, исходя из соображений симметрии волновых функций, который впоследствии приводится к виду стандартного анизотропного гамильтониана Дирака. Затем в разделе (1.2) выведено граничное условие (ГУ) обеспечивающее эрмитовость анизотропного уравнения Дирака в ограниченном пространстве и найдены спектры поверхностных состояний (ПС) для полубесконечной системы. Раздел (1.3) посвящён квантованию энергетического спектра дираковских фермионов в нанопроволоке, описываемой изотропным уравнением Дирака. В разделе (1.4) вычисляется аарон-бомовский вклад ПС в магнитопроводимость нанопроволоки.

1.1. $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -гамильтониан в L долине $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x(\text{Se}, \text{Te})$, Bi и $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$

1.1.1. $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x(\text{Se}, \text{Te})$

Кристаллические сплавы $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x(\text{Se}, \text{Te})$ являются узкощелевыми полупроводниками с гранецентрированной кристаллической решёткой. Известно, что наиболее близко к уровню Ферми подходят две вырожденные по спину зоны в L -точках (долинах) на границе зоны Бриллюэна. В зоне Брил-

Таблица 1.1. Характеры классов некоторых двойных представлений группы D_{3d} [96]

	E	\bar{E}	$2C_3$	$2\bar{C}_3$	$3U_2$	$3\bar{U}_2$	I	\bar{I}	$2IC_3$	$2\bar{I}C_3$	$3IU_2$	$3\bar{I}U_2$	базис
L_6^+	2	-2	1	-1	0	0	2	-2	1	-1	0	0	$ \uparrow\rangle, \downarrow\rangle$
L_6^-	2	-2	1	-1	0	0	-2	2	-1	1	0	0	$ z \uparrow\rangle, z \downarrow\rangle$
L_1^+	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	S
L_2^+	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	
L_3^+	2	-2	-1	1	0	0	2	-2	-1	1	0	0	
L_1^-	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	
L_2^-	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	z
L_3^-	2	-2	-1	1	0	0	-2	2	1	-1	0	0	x, y

люэна гранецентрированной решётки четыре неэквивалентные L -точки. Для определённости мы рассмотрим долину L , отвечающую волновому вектору $\mathbf{k}_L = (\pi/a)(1, 1, 1)$. Точечной группой волнового вектора \mathbf{k}_L является группа D_{3d} . Считается, что две ближайшие зоны к уровню Ферми преобразуются по неприводимым представлениям L_6^+ , L_6^- двойной группы D_{3d} [55]. В таблице (1.1) приведены характеры классов необходимых в дальнейшем спинорных неприводимых представлений группы D_{3d} .

В таблице (1.1) E – тождественный элемент, C_3 – поворот на $2\pi/3$ вокруг вертикальной оси, U_2 – класс поворотов на π вокруг горизонтальной осей, I – инверсия. Для вывода $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -гамильтониана в точке \mathbf{k}_L удобно работать в системе координат, в которой ось z || $[111]$, ось y || $[1\bar{1}0]$ и ось x || $[\bar{1}\bar{1}2]$. В указанной системе координат мы выберем в качестве базиса представления L_6^+ функции $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$, и $|z \uparrow\rangle, |z \downarrow\rangle$ для представления L_6^- . Введём два набора матриц Паули в стандартном представлении: $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$, $\tau = (\tau_x, \tau_y, \tau_z)$ и единичные матрицы σ_0, τ_0 размера 2×2 , которые далее будут действовать в пространстве спинов и зон (L_6^\pm), соответственно. Запишем матрицы, по которым преобразуются базисные функции представлений L_6^\pm :

$D_{\pm}(C_3) = \sigma_0 \cos(\pi/3) + i\sigma_z \sin(\pi/3)$, $D_{\pm}(C_3^{-1}) = D_{\pm}(C_3)^+$, $D_{\pm}(U_2^{(1)}) = \pm i\sigma_y$,
 $D_{\pm}(U_2^{(2)}) = \pm i\sigma_y \cos(\pi/3) \mp i\sigma_x \sin(\pi/3)$, $D_{\pm}(U_2^{(3)}) = \pm i\sigma_y \cos(\pi/3) \pm i\sigma_x \sin(\pi/3)$,
 $D_{\pm}(I) = \pm\sigma_0$, $D_{\pm}(IU_2^{(1)}) = \pm D_{\pm}(U_2^{(1)})$, $D_{\pm}(IU_2^{(2)}) = \pm D_{\pm}(U_2^{(2)})$, $D_{\pm}(IU_2^{(3)}) =$
 $\pm D_{\pm}(U_2^{(3)})$, $D_{\pm}(\bar{g}) = -D_{\pm}(g)$, где g произвольный элемент группы D_{3d} . Здесь $U_2^{(1)}$ – это поворот на угол π вокруг оси y , $U_2^{(2,3)}$ – поворот на угол π вокруг осей, полученных поворотом оси y на углы $\pm\pi/3$ вокруг оси z . В методе инвариантов $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -гамильтониан выводится из условий, которые накладывают элементы симметрии: $H(\mathbf{k}) = D(g)H(g^{-1}\mathbf{k})D^{-1}(g)$, где

$$D(g) = \begin{pmatrix} D_+(g) & 0 \\ 0 & D_-(g) \end{pmatrix}. \quad (1.1)$$

В пространстве зон $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -гамильтониан выглядит следующим образом:

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} H_{++}(\mathbf{k}) & H_{+-}(\mathbf{k}) \\ H_{-+}(\mathbf{k}) & H_{--}(\mathbf{k}) \end{pmatrix}. \quad (1.2)$$

Наиболее интересным в формуле (1.2) является недиагональный член, который описывает $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ взаимодействие двух зон. Он удовлетворяет следующему условию: $H_{+-}(\mathbf{k}) = D_+(g)H_{+-}(g^{-1}\mathbf{k})D_-^{-1}(g)$. Следуя методу инвариантов, разложим прямое произведение $L_6^+ \times L_6^{-*}$ на неприводимые составляющие. Для этого используем известную формулу

$$N_i = \frac{1}{24} \sum_g \chi_i^*(g)\chi_+^*(g)\chi_-(g), \quad (1.3)$$

которая непосредственно следует из соотношения ортогональности характеров. Здесь N_i показывает сколько раз i -ое представление группы D_{3d} с характером $\chi_i(g)$ входит в прямое произведение, $\chi_{\pm}(g)$ – характеры представлений L_6^{\pm} соответственно, 24 – число элементов двойной группы. Непосредственной подстановкой характеров из таблицы (1.1) получим: $L_6^+ \times L_6^{-*} = L_1^- + L_2^- + L_3^-$. В методе инвариантов гамильтониан H_{+-} составляется из членов инвариантных по отношению ко всем преобразованиям группы D_{3d} , приведенных в таблице (1.2). С точностью до линейных членов включительно имеем:

$H_{+-} = v_1(\sigma_y k_x - \sigma_x k_y) + v_2 \sigma_z k_z$. Из требования инвариантности гамильтониана (1.2) по отношению к инверсии времени следует действительность параметров v_1, v_2 . Требование эрмитовости для H (1.2) приводит к соотношению $H_{-+} = H_{+-}^+$.

Таблица 1.2. Инвариантные слагаемые, входящие в $H_{+-}(\mathbf{k})$

представление	матрицы	квазиимпульс	инвариантные слагаемые
L_1^-			
L_2^-	σ_z	k_z	$\sigma_z k_z$
L_3^-	$\{\sigma_y, -\sigma_x\}$	$\{k_x, k_y\}$	$\sigma_y k_x - \sigma_x k_y$

Для того чтобы найти диагональные блоки H , разложим на неприводимые представления прямые произведения $L_6^\pm \times L_6^{\pm*}$. Снова, пользуясь снова таблицей характеров (1.1) и формулой (1.3), получаем $L_6^\pm \times L_6^{\pm*} = L_1^+ + L_2^+ + L_3^+$. Следовательно, инвариантным слагаемым в диагональных частях вплоть до линейных членов по \mathbf{k} включительно может быть только слагаемое вида $m\sigma_0$. Поэтому диагональные части гамильтониана равны $H_{++} = -H_{--} = m\sigma_0$. Таким образом, нами выведен двухзонный $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -гамильтониан, описывающий дисперсию электронов в кристалле $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x(\text{Se}, \text{Te})$ в окрестности волнового вектора $\mathbf{k}_L = (\pi/a)(1, 1, 1)$:

$$H = m\tau_z \otimes \sigma_0 + \tau_x \otimes (v_1 k_x \sigma_y - v_1 k_y \sigma_x) + v_2 k_z \tau_y \otimes \sigma_0. \quad (1.4)$$

Аналогичным образом может быть получен $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -гамильтониан в остальных L долинах. Гамильтониан (1.4) унитарным преобразованием сводится к гамильтониану Дирака $H_D = U_1 H U_1^+$:

$$H_D = m\tau_z \otimes \sigma_0 + \tau_x \otimes (v_1 k_x \sigma_x + v_1 k_y \sigma_y) + v_2 k_z \tau_x \otimes \sigma_z. \quad (1.5)$$

Преобразование U_1 задаётся следующей матрицей:

$$U_1 = \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & -i\sigma_0 \end{pmatrix}. \quad (1.6)$$

В итоге мы получили, что в L долине $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x(\text{Se},\text{Te})$ зонная структура описывается эффективным гамильтонианом Дирака (1.5), что и является главным результатом данного раздела.

1.1.2. $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$

Висмут и сурьма являются полуметаллами, которые имеют одинаковый ромбоэдрический тип кристаллической решётки [97]. Она получается из гранецентрированной решётки сдвигом вдоль пространственной диагонали куба, что приводит к небольшому отличию зон Бриллюэна висмута и/или сурьмы от зоны Бриллюэна гранецентрированной решетки. Так, в рассматриваемых полуметаллах имеется всего три неэквивалентные L долины, лежащих на границах зоны Бриллюэна. Малой точечной группой волнового вектора точки L в висмуте является группа C_{2h} [98]. Для каждой из трех точек L плоскость $\Gamma - T - L$ является плоскостью зеркальной симметрии. Будем работать в декартовой системе координат, в которой ось x перпендикулярна плоскости $\Gamma - T - L$, ось z направлена по тригональной оси $\Gamma - T$. Известно, что в рамках $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -подхода двухзонное приближение в L достаточно хорошо описывает объёмные свойства висмута [99]. Каждая из двух ближайших к уровню Ферми подзон двукратно вырождена по спину. Зона проводимости в висмуте имеет симметричное по отношению к инверсии представление $L_s = (L_6, L_5)$. Валентная зона имеет антисимметричное представление $L_a = (L_7, L_8)$. Пользуясь таблицей характеров группы C_{2h} (1.3) легко получим матрицы неприводимых спинорных представлений для двух указанных зон: $D_{s,a}(E) = \sigma_0, D_s(I) = -D_a(I) = \sigma_0, D_s(C_2(x)) = -D_a(C_2(x)) = -i\sigma_z, D_{s,a}(M_x) = -i\sigma_z; D_{s,a}(g) = -D_{s,a}(\bar{g})$, где g обозначает произвольный элемент группы C_{2h} .

В таблице (1.3) E – тождественное преобразование, $C_2(x)$ – поворот на π вокруг оси x , M_x – отражение в плоскости перпендикулярной оси x , I –

Таблица 1.3. Характеры спинорных представлений группы C_{2h} [96].

	E	\bar{E}	$C_2(x)$	$\bar{C}_2(x)$	M_x	\bar{M}_x	I	\bar{I}	базис
L_1	1	1	1	1	1	1	1	1	
L_2	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	
L_3	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	x
L_4	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	$y; z$
L_5	1	-1	i	$-i$	i	$-i$	1	-1	
L_6	1	-1	$-i$	i	$-i$	i	1	-1	
L_7	1	-1	i	$-i$	$-i$	i	-1	1	
L_8	1	-1	$-i$	i	i	$-i$	-1	1	

инверсия. Повторяя рассуждения предыдущего раздела, запишем двухзонный гамильтониан в виде:

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} H_{ss}(\mathbf{k}) & H_{sa}(\mathbf{k}) \\ H_{as}(\mathbf{k}) & H_{aa}(\mathbf{k}) \end{pmatrix}. \quad (1.7)$$

Начнём с недиагонального члена H_{sa} , описывающего $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -взаимодействие зон. Симметрия накладывает на него следующие ограничения:

$$H_{sa}(\mathbf{k}) = D_s(g)H_{sa}(g^{-1}\mathbf{k})D_a^{-1}(g) \quad (1.8)$$

Для того чтобы найти явный вид H_{sa} , нам необходимо разложить на неприводимые составляющие прямое произведение представлений $L_s \times L_a^*$. Используя формулу (1.3), в которой 24 нужно заменить на 8 (число элементов в группе C_{2h}), получим: $L_s \times L_a^* = 2L_3 + 2L_4$. В таблице (1.4) приведены все возможные инвариантные слагаемые, которые должны быть включены в H_{sa} . Поэтому имеем

$$H_{sa} = t_1\sigma_x k_x + t_2\sigma_y k_x + (u_{11}\sigma_z - iu_{12}\sigma_0)k_y + (u_{21}\sigma_z - iu_{22}\sigma_0)k_z, \quad (1.9)$$

где $t_{1,2}$, $u_{11,12,21,22}$ – параметры гамильтониана. Инвариантность H_{sa} по отношению к инверсии времени требует, чтобы параметры $t_{1,2}$ и $u_{11,12,21,22}$ были

Таблица 1.4. Инвариантные слагаемые, входящие в $H_{sa}(\mathbf{k})$.

представление	матрицы	импульс	инвариантные слагаемые
L_3	$\sigma_x; \sigma_y$	k_x	$\sigma_x k_x; \sigma_y k_x$
L_4	$\sigma_z; \sigma_0$	$k_y; k_z$	$\sigma_z k_y; \sigma_z k_z; \sigma_0 k_y; \sigma_0 k_z$

действительными. Из эрмитовости следует $H_{as} = H_{sa}^+$.

Для диагональных частей прямое произведение раскладывается следующим образом: $L_s \times L_a^* = 2L_1 + 2L_2$. Представление L_1 преобразуется по единичному представлению, из чего следует, что H_{ss} и H_{aa} содержат член пропорциональный $m\sigma_0$. Таким образом, двухзонный $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -гамильтониан выглядит следующим образом:

$$H = \begin{pmatrix} m & 0 & u_1 k_y + u_2 k_z & t k_x \\ 0 & m & t^* k_x & -u_1^* k_y - u_2^* k_z \\ u_1^* k_y + u_2^* k_z & t k_x & -m & 0 \\ t^* k_x & -u_1 k_y - u_2 k_z & 0 & -m \end{pmatrix}, \quad (1.10)$$

где мы ввели обозначения $u_1 = u_{11} - iu_{12}$, $u_2 = u_{21} - iu_{22}$, $t = t_1 - it_2$, удобные для дальнейшего использования. На следующем шаге на пути к гамильтониану Дирака нам нужно совершить унитарное преобразование $\tilde{\Psi} = U\Psi$ вместе с вращением системы координат вокруг оси x на некоторый угол α , который мы определим позднее (см. (1.12)). Унитарное преобразование задаётся матрицей $U = \exp(-i\beta\tau_0 \otimes \sigma_z - i\gamma\tau_z \otimes \sigma_z)$. Параметры β , γ и угол α мы определяем из тех условий, чтобы в преобразованном гамильтониане $\tilde{H} = UHU^+$ скорости были действительными положительными величинами, а также, чтобы электронный энергетический спектр, следующий из \tilde{H} , получался записанным в главных осях. После надлежащего выбора параметров преобразования U получаем гамильтониан \tilde{H} :

$$\tilde{H}_{\pm} = m\tau_z \otimes \sigma_0 \pm v_2 k_y' \tau_x \otimes \sigma_z - v_3 k_z' \tau_y \otimes \sigma_0 + v_1 k_x \tau_x \otimes \sigma_x, \quad (1.11)$$

в котором $v_1 = |t|$, $v_2 = \sqrt{|u_1|^2 \cos^2 \alpha + \operatorname{Re}(u_1 u_2^*) \sin 2\alpha + |u_2|^2 \sin^2 \alpha}$,
 $v_3 = \sqrt{|u_2|^2 \cos^2 \alpha - \operatorname{Re}(u_1 u_2^*) \sin 2\alpha + |u_1|^2 \sin^2 \alpha}$. Штрихи над k_y , k_z означают, что они определены в системе координат, в которой оси y и z повёрнуты относительно исходной системы координат на угол α вокруг оси x . Угол α определяется следующим соотношением

$$\alpha = \frac{1}{2} \arctan \left(\frac{2\operatorname{Re}(u_1 u_2^*)}{|u_1|^2 - |u_2|^2} \right). \quad (1.12)$$

Гамильтониан \tilde{H}_{\pm} определяется с точностью до знака перед v_2 , который не влияет на дисперсию электронов. С точки зрения топологической классификации полученного гамильтониана этот знак называется зеркальной киральностью ("mirror chirality") и характеризует два топологически различных гамильтониана \tilde{H}_{\pm} [100].

На заключительном шаге из \tilde{H}_{\pm} (1.11) мы получаем гамильтониан Дирака

$$H_D = U_{\pm} \tilde{H}_{\pm} U_{\pm}^{\dagger} = m\tau_z \otimes \sigma_0 + \tau_x \otimes (v_1 k_x \sigma_x + v_2 k'_y \sigma_y + v_3 k'_z \sigma_z). \quad (1.13)$$

при помощи унитарного преобразования U_{\pm} :

$$U_{\pm} = \frac{e^{i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -i & \pm 1 & 0 & 0 \\ \pm i & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \pm i \\ 0 & 0 & \pm 1 & -i \end{pmatrix} \quad (1.14)$$

Финальной формулой этого раздела является анизотропный гамильтониан Дирака (1.13).

1.2. Граничное условие для анизотропного уравнения

Дирака в ограниченном пространстве

В предыдущем разделе получен анизотропный гамильтониан Дирака, который описывает динамику электронов в L долине неограниченных кри-

сталлов Bi , $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ и $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x(\text{Se}, \text{Te})$. Этот раздел посвящён проблеме применения гамильтониана Дирака для описания ограниченных кристаллов. В рамках $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -приближения гамильтониан Дирака действует не на полную волновую функцию, а лишь на столбец, составленный из медленно меняющихся на масштабах постоянной решетки функций, называемых огибающими. В рамках данного подхода обрыв кристаллического потенциала на границе можно учитывать с помощью ГУ, которому должна удовлетворять огибающая функция на поверхности кристалла [101]. С точки зрения математики уравнение Дирака представляет собой систему четырёх линейных дифференциальных уравнений первого порядка. Поэтому общее ГУ мы будем искать в виде линейной комбинации двух спиноров:

$$(\Psi_v - M\Psi_c)|_S = 0, \quad (1.15)$$

здесь $\Psi_{c,v}$ – это огибающие спинорные функции (далее просто спиноры), которые отвечают зоне проводимости и валентной зоне соответственно, M – некоторая квадратная матрица размера 2×2 , элементы которой феноменологически описывают строение поверхности на атомных масштабах, S обозначает поверхность трёхмерного кристалла. При этом матрица M не может быть выбрана произвольным образом, поскольку ГУ (1.15) должно приводить к исчезновению нормальной компоненты квантового-механического тока на поверхности кристалла. Для удовлетворения этому условию представим матрицу M в виде линейной комбинации трёх матриц Паули и единичной матрицы: $M = a_1\sigma_x + a_2\sigma_y + a_3\sigma_z + a_4\sigma_0$, где $a_{1,2,3,4}$ – неизвестные комплексные граничные параметры. Условие отсутствия квантово-механического тока по нормали к поверхности кристалла записывается следующим образом:

$$\langle \Psi | \mathbf{j} \cdot \mathbf{n} | \Psi \rangle |_S = 0, \quad (1.16)$$

$\Psi = (\Psi_c, \Psi_v)^T$, \mathbf{n} – внутренняя нормаль к поверхности кристалла S , оператор плотности тока вероятности гамильтониана Дирака определяется выражением

$j_i = \partial H_D / \partial k_i = v_i \tau_x \otimes \sigma_i$, $i = x, y, z$. Подставляя ГУ (1.15) в уравнение (1.16) получим уравнение, которому должна удовлетворять матрица M :

$$\sum_{i=x,y,z} v_i \sigma_i n_i M + M^+ \sum_{i=x,y,z} v_i \sigma_i n_i = 0. \quad (1.17)$$

Условие (1.16) эквивалентно построению самосопряженного расширения гамильтониана Дирака в ограниченном пространстве, что автоматически приводит к действительным собственным значениям. Второе ограничение на вид матрицы M получается из условия инвариантности ГУ по отношению к симметрии инверсии времени, задаваемой оператором $T = \tau_0 \otimes i\sigma_y K$:

$$\sigma_y M^* \sigma_y = M. \quad (1.18)$$

Из уравнений (1.17), (1.18) следует, что матрица M в ГУ (1.15) определяется единственным действительным граничным параметром a_0 :

$$M = ia_0 \left[n_x \sigma_x + n_y \frac{v_y}{v_x} \sigma_y + n_z \frac{v_z}{v_x} \sigma_z \right] \quad (1.19)$$

Теперь посмотрим к каким ограничениям на значения параметра a_0 может привести наличие пространственной симметрии полубесконечного кристалла. В качестве примера рассмотрим кристаллический сплав $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x(\text{Se}, \text{Te})$. Гамильтониан Дирака выведен нами в системе координат $z || [111]$, $y || [1\bar{1}0]$, $x || [\bar{1}\bar{1}2]$, в которой плоскость перпендикулярная оси y является плоскостью зеркальной симметрии. Оператор зеркальной симметрии представляется матрицей $\tilde{D}(M_y) = -i\tau_z \otimes \sigma_y$. Рассмотрим поверхность с нормалью $\mathbf{n} = (n_x, 0, n_y)$, лежащей в плоскости зеркальной симметрии. ГУ для биспинорной функции Ψ можно записать так $\Gamma \Psi|_S = 0$, с граничным оператором

$$\Gamma = \begin{pmatrix} -M & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.20)$$

матрица M определена в (1.19). Требование инвариантности ГУ по отношению к отражению в зеркальной плоскости приводит к соотношению:

$$M_y \Gamma \Psi|_S = \tilde{D}(M_y) \Gamma \tilde{D}^{-1}(M_y) \tilde{D}(M_y) \Psi|_S = -\Gamma \tilde{\Psi}|_S = 0, \quad (1.21)$$

В силу того, что ГУ $\Gamma\Psi|_S = 0$ и $-\Gamma\tilde{\Psi}|_S = 0$ эквивалентны ($\tilde{\Psi} = D(M_y)\Psi(x, -y, z)$), то зеркальная симметрия в данном случае никак не ограничивает значения параметра a_0 .

Найдём энергетические спектры ПС анизотропного уравнения Дирака

$$[m\tau_z \otimes \sigma_0 + \tau_x \otimes (v_x k_x \sigma_x + v_y k_y \sigma_y + v_z k_z \sigma_z)] \Psi = E\Psi, \quad (1.22)$$

определённого на полупространстве $z \geq 0$, с ГУ (1.15), (1.19) в плоскости $z = 0$. Из уравнения (1.22) выразим Ψ_v через Ψ_c и подставим в ГУ (1.15). После этой процедуры спинор Ψ_c удовлетворяет дифференциальному уравнению:

$$-v_z^2 \hbar^2 \frac{d^2}{dz^2} \Psi_c = (E^2 - m^2 - v_x^2 k_x^2 - v_y^2 k_y^2) \Psi_c \quad (1.23)$$

и граничному условию:

$$\left[-i\sigma_z \left(v_z \hbar \frac{d}{dz} + a_0 (E + m) \frac{v_z}{v_x} \right) + v_x k_x + v_y k_y \right] \Psi_c \Big|_{z=0} = 0. \quad (1.24)$$

Обе компоненты спинора Ψ_c из уравнения (1.23) пропорциональны $\sim e^{-\kappa z}$, $\kappa = \sqrt{m^2 + v_x^2 k_x^2 + v_y^2 k_y^2 - E^2}/v_z$. После подстановки их в ГУ (1.24) получим спектр ПС (см. рис. 1.1):

$$E = s \frac{2\tilde{a}_0}{1 + \tilde{a}_0^2} \sqrt{v_x^2 k_x^2 + v_y^2 k_y^2} + m \frac{1 - \tilde{a}_0^2}{1 + \tilde{a}_0^2}, \quad (1.25)$$

$$2m\tilde{a}_0 - s(1 - \tilde{a}_0^2) \sqrt{v_x^2 k_x^2 + v_y^2 k_y^2} \geq 0,$$

где $\tilde{a}_0 = a_0 v_z / v_x$, $s = \pm$ – квантовое число оператора киральности $\tau_z \otimes (v_x \sigma_x p_x + v_y \sigma_y p_y) / \sqrt{v_x^2 p_x^2 + v_y^2 p_y^2}$. Знак параметра a_0 описывает два качественно различных случая: (i) при $\tilde{a}_0 \geq 0$ ПС пересекают запрещенную зону (см. красные прямые на рис.1.1) далее мы будем называть такие ПС – ПС топологического типа; (ii) при $\tilde{a}_0 \leq 0$ ПС находятся вне запрещенной зоны (пунктирные синие линии на рис.1.1), в этом случае мы будем называть ПС нетопологическими. Следовательно, при помощи ГУ (1.15) с матрицей M в виде (1.19) можно феноменологически описывать два типа ПС в кристаллических соединениях

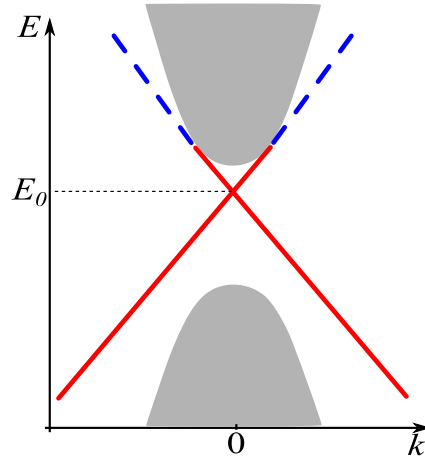


Рис. 1.1. Энергетический спектр ПС (1.25) уравнения Дирака на полупространстве $z \geq 0$. При $\tilde{a}_0 > 0$ в запрещенной зоне образуются ПС с коническим законом дисперсии (красные прямые) похожим на спектр ПС в ТИ, называемые далее ПС топологического типа. При $\tilde{a}_0 < 0$ спектр ПС (синий пунктир) представляет собой часть конической поверхности, перекрывающейся по энергии с объемными состояниями. Поэтому ПС при $\tilde{a}_0 < 0$ мы будем называть нетопологическими. Энергия вершины конуса E_0 задается выражением: $E_0 = m(1 - \tilde{a}_0^2)/(1 + \tilde{a}_0^2)$. Серым цветом показан континуум объёмных состояний.

$\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Se}$, существующих в случае прямого или инвертированного порядков зон [10, 11].

1.3. Дираковские фермионы в нанопроволоке

1.3.1. Нулевое магнитное поле

В данном разделе мы рассмотрим квантование дираковских фермионов, описываемых изотропным уравнением Дирака

$$\{m\tau_z \otimes \sigma_0 + v\tau_x \otimes (\boldsymbol{\sigma}\mathbf{k})\} \Psi = E\Psi, \quad (1.26)$$

в цилиндрической нанопроволоке с радиусом R в отсутствие магнитного поля. На поверхности проволоки $r = R$ спиноры Ψ_c и Ψ_v удовлетворяют граничному условию (1.15), в котором матрица M задается уравнением (1.19) с $v_x = v_y = v_z = v$. Мы также будем считать, что граничный параметр

a_0 является постоянным на всей поверхности нанопроволоки. Ось z направим вдоль оси проволоки. В силу однородности задачи по направлению оси z проекция квазиимпульса k_z сохраняется. Аксиальная симметрия задачи приводит к сохранению проекции полного углового момента $J_z = \sigma_0 \otimes j_z$, с $j_z = \sigma_0(-i\partial_\theta) + \sigma_z/2$, имеющего собственные числа $j = \pm 1/2, 3/2, 5/2, \dots$. Следовательно спиноры $\Psi_{c,v}$ можно искать в следующем виде:

$$\Psi_{c,v} = \begin{pmatrix} \psi_{c,v}^{(1)}(r)e^{i(j-1/2)\theta} \\ \psi_{c,v}^{(2)}(r)e^{i(j+1/2)\theta} \end{pmatrix} e^{ik_z z}. \quad (1.27)$$

Поступая как в предыдущем разделе, сведём исходную задачу к уравнению и граничному условию только на спинор Ψ_c . Радиальные волновые функции $\psi_c^{(1,2)}$ удовлетворяют уравнению Бесселя:

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{\partial}{r\partial r} + \frac{(j \mp 1/2)^2}{r^2} \right) \psi_c^{(1,2)} = \left(\frac{E^2 - m^2}{\hbar^2 v^2} - k_z^2 \right) \psi_c^{(1,2)}, \quad (1.28)$$

и ГУ:

$$\begin{pmatrix} i \left(\partial_r - \frac{j-1/2}{R} - a_0 \frac{(E+m)}{\hbar v} \right) & k_z \\ -k_z & i \left(\partial_r + \frac{j+1/2}{R} - a_0 \frac{(E+m)}{\hbar v} \right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_c^{(1)}(r) \\ \psi_c^{(2)}(r) \end{pmatrix} \Big|_{r=R} = 0. \quad (1.29)$$

Нормируемые в начале координат радиальные волновые функции $\psi_c^{(1,2)}$ выражаются через функции Бесселя первого рода: $\psi_c^{(1,2)}(r) = C_{1,2} J_{j \mp 1/2}(kr)$, в которых роль радиального волнового вектора играет $k = \sqrt{E^2 - m^2 - \hbar^2 v^2 k_z^2} / \hbar v$, $C_{1,2}$ – произвольные постоянные. ГУ (1.29) связывает $C_{1,2}$ и приводит к дисперсионному уравнению:

$$k \left[\frac{J_{j-1/2}(kR)}{J_{j+1/2}(kR)} - \frac{J_{j+1/2}(kR)}{J_{j-1/2}(kR)} \right] = \left(a_0 - \frac{1}{a_0} \right) \frac{E}{\hbar v} + \left(a_0 + \frac{1}{a_0} \right) \frac{m}{\hbar v}. \quad (1.30)$$

В дисперсионном уравнении (1.30) ПС отвечают мнимые значения k , размерно-квантованным – действительные. Непосредственной проверкой можно убедиться, что уравнение (1.30) не меняется при одновременной замене $a_0 \rightarrow 1/a_0$, $E \rightarrow -E$. Поэтому достаточно рассмотреть случай $|a_0| \leq 1$. Из свойств

функции Бесселя целого индекса $J_{-j\mp 1/2}(x) = (-1)^{j\pm 1/2} J_{j\pm 1/2}(x)$ следует двукратное вырождение всех состояний по знаку j , что является следствием аксиальной симметрии задачи. Энергетический спектр дираковских фермионов, описываемый уравнением (1.30) представлен на рисунке (1.2). Как и в случае полупространства при $a_0 > 0$ в объемной запрещенной зоне образуются поверхностные подзоны топологического типа (см. рис.1.2b), при $a_0 < 0$ нетопологические поверхностные подзоны образуются на фоне размерно-квантованных состояний (см. рис.1.2a). В пределе $|k_z| \rightarrow \infty$ энергии размерно-квантованных подзон выходят на асимптоту: $E = \pm \hbar v \sqrt{m^2/\hbar^2 v^2 + k_z^2 + \gamma_{j\pm 1/2, n}^2/R^2}$, где $\gamma_{j\pm 1/2, n}$ – это n -ый нуль функции Бесселя первого рода $J_{j\pm 1/2}$. Благодаря полужелтому квантованию j в спектре поверхностных подзон топологического типа образуется щель, которая пропорциональна $\hbar v_s |j|/R$ ($v_s = 2a_0 v/(1 + a_0^2)$) в пределе толстых нанопроволок $|a_0| m R/\hbar v \gg 1$. Когда глубина локализации ПС κ^{-1} много меньше радиуса проволоки R (т.е. $\kappa R \gg j^2$) их энергетический спектр выходит на асимптоты:

$$\begin{aligned} E &= s v_s \hbar \sqrt{k_z^2 + \frac{j^2}{R^2} + E_0}, \\ \kappa &= \frac{m}{v \hbar} - s \frac{E_0}{m} \sqrt{k_z^2 + \frac{j^2}{R^2}} \geq 0. \end{aligned} \quad (1.31)$$

Полная биспинорная волновая функция состояния с определенным j и k_z имеет вид:

$$\Psi = C \begin{pmatrix} J_{j-1/2}(kr) e^{i(j-1/2)\theta} \\ \frac{i}{\hbar v k_z} \left(\hbar v k - a_0 (E + m) \tilde{J} \right) J_{j+1/2}(kr) e^{i(j+1/2)\theta} \\ \frac{1}{\hbar v k_z} \left(E - m - a_0 \hbar v k \tilde{J} \right) J_{j-1/2}(kr) e^{i(j-1/2)\theta} \\ C i a_0 \tilde{J} J_{j+1/2}(kr) e^{i(j+1/2)\theta} \end{pmatrix} e^{i k_z z}, \quad (1.32)$$

$\tilde{J} = J_{j-1/2}(kR)/J_{j+1/2}(kR)$, C -нормировочный множитель. В следующем разделе мы исследуем влияние продольного магнитного поля на состояния в нанопроволоке.

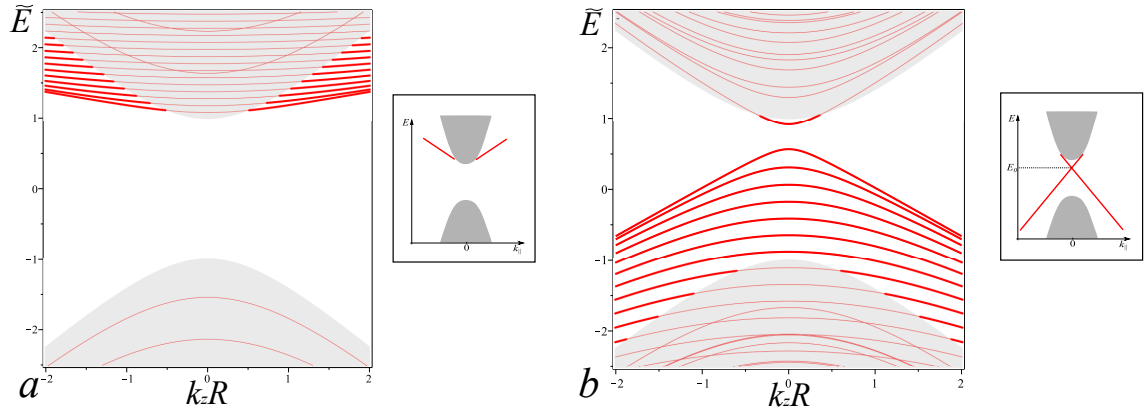


Рис. 1.2. Спектр подзон ($\tilde{E} = ER/\hbar c$) дираковских фермионов в нанопроволоке для двух типов значений граничного параметра a_0 : а) при $a_0 = -0.1$ и $mR/\hbar c = 2$ б) $a_0 = 0.4$ и $mR/\hbar c = 3$; Жирными красными кривыми выделены спектры поверхностных подзон нетопологического рис.1.2а и топологического рис.1.2б типов. Спектры ПС для полупространства показаны на вставках. Серым цветом закрашена область размерно-квантованных состояний. Все подзоны двукратно вырождены по знаку j .

1.3.2. Продольное постоянное магнитное поле

В $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -теории, развитой в работах Латтинджера и Кона [102], включение магнитного поля в эффективный гамильтониан происходит путём замены $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + e\mathbf{A}$ в членах, содержащих квазиимпульс, и добавления $g e \hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} / 2m_0$ к диагональным блокам гамильтониана Дирака (заряд электрона $-e$, m_0 – масса свободного электрона, g – значение g -фактора электрона в кристалле). В полях $\lesssim 50\text{T}$ последним членом можно пренебречь, что и будет сделано далее в этом разделе. Сначала исследуем влияние однородного продольного магнитного поля $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ на энергетический спектр состояний в нанопроволоке. Для этого удобно выбрать вектор-потенциал \mathbf{A} в цилиндрической калибровке $\mathbf{A} = (-By/2, Bx/2, 0)$. Далее, для определенности, будем предполагать, что $B > 0$. Для выбранной калибровки вектор-потенциала j и k_z снова являются квантовыми числами задачи. Поэтому спиноры $\Psi_{c,v}$ по-прежнему можно искать в виде (1.27). После сведения исходной задачи к задаче только на спинор Ψ_c , волновые функции радиального движения удовлетворяя-

ют уравнению:

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{\partial}{r\partial r} + \frac{(j \mp 1/2)^2}{r^2} + \frac{j \pm 1/2}{\lambda^2} + \frac{r^2}{4\lambda^4} \right) \psi_c^{(1,2)} = \frac{(E^2 - m^2 - \hbar^2 v^2 k_z^2)}{\hbar^2 v^2} \psi_c^{(1,2)}, \quad (1.33)$$

где $\lambda^2 = \hbar c/eB$ – квадрат магнитной длины. ГУ для функций $\psi_c^{(1,2)}$ выглядит следующим образом:

$$\left(\begin{array}{cc} ik_z & \left[\partial_r + \frac{j+1/2}{R} + \frac{R}{2\lambda^2} + a_0 \frac{(E+m)}{\hbar v} \right] \\ \left[\partial_r - \frac{j-1/2}{R} - \frac{R}{2\lambda^2} + a_0 \frac{(E+m)}{\hbar v} \right] & -ik_z \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} \psi_c^{(1)}(r) \\ \psi_c^{(2)}(r) \end{array} \right) \Big|_{r=R} = 0. \quad (1.34)$$

В уравнениях (1.33) сделаем подстановку:

$$\psi_c^{(1,2)} = \xi^{|j \mp 1/2|/2} \exp(-\xi/2) w_{1,2}(\xi), \quad (1.35)$$

в которой введена новая безразмерная переменная $\xi = r^2/2\lambda^2$. Тогда неизвестные функции $w_{1,2}$ будут удовлетворять вырожденным гипергеометрическим уравнениям:

$$\xi w''_{1,2} + (|j \mp 1/2| + 1 - \xi) w'_{1,2} + \left(\Delta - \frac{|j \mp 1/2| + (j \pm 1/2) + 1/2}{2} \right) w_{1,2} = 0, \quad (1.36)$$

где $\Delta = \lambda^2 (E^2 - m^2 - \hbar^2 v^2 k_z^2) / 2\hbar^2 v^2$. Нормируемое в начале координат решения уравнений (1.36) выражаются через функции Куммера $M(\alpha, \beta, \xi)$ [103].

В результате, найденные радиальные волновые функции имеют вид:

$$\psi_c^{(1,2)}(r) = C_{1,2} \left(\frac{r}{\sqrt{2}\lambda} \right)^{|j \mp 1/2|} e^{-\frac{r^2}{4\lambda^2}} \times M \left(-\Delta + \frac{|j \mp 1/2| + (j \pm 1/2) + 1}{2}, |j \mp 1/2| + 1, \frac{r^2}{2\lambda^2} \right). \quad (1.37)$$

Продольное магнитное поле снимает симметрию спектра $j \rightarrow -j$. Поэтому энергетический спектр дираковских фермионов в нанопроволоке описывается разными дисперсионными уравнениями для $j \geq 1/2$ и $j \leq 1/2$. После подстановки (1.37) в ГУ (1.34) получим при $j \leq 1/2$:

$$\left[2j - 1 - \frac{a_0 R (E + m) \widetilde{M}_1}{\hbar v} \right] \cdot \left[\frac{R^2 k^2}{2(j - \frac{1}{2})} + \frac{a_0 R (E + m)}{\hbar v \widetilde{M}_1} \right] + k_z^2 R^2 = 0, \quad (1.38)$$

где $\widetilde{M}_1 = M(1 - \lambda^2 k^2/2, -j + 3/2, R^2/2\lambda^2)/M(-\lambda^2 k^2/2, -j + 1/2, R^2/2\lambda^2)$. Аналогично получим дисперсионное уравнение при $j \geq 1/2$:

$$\left[2j + 1 + \left(j + \frac{1}{2} + \frac{a_0 R(E + m)}{\hbar v} \right) \widetilde{M}_2 \right] \cdot \left[\frac{R^2 (\Delta - 1)}{\lambda^2 (j - \frac{1}{2})} - \frac{a_0 R(E + m)}{\hbar v \widetilde{M}_2} \right] + k_z^2 R^2 = 0, \quad (1.39)$$

где $\widetilde{M}_2 = M(-\Delta + j + 1/2, j + 3/2, R^2/2\lambda^2)/M(-\Delta + j + 1/2, j + 1/2, R^2/2\lambda^2)$. Характерный спектр, полученный при помощи численного расчёта, представлен на рисунке (1.3). Он состоит из подзон трёх типов. Первый тип – это подзоны уровней Ландау, которые в цилиндрической калибровке вектор-потенциала определяются формулой:

$$E = \pm \sqrt{2 \frac{\hbar^2 v^2}{\lambda^2} \left(n + \frac{|j + \frac{1}{2}| + j - \frac{1}{2} + 1}{2} \right) + m^2 + \hbar^2 v^2 k_z^2}, \quad (1.40)$$

где $n = 0, 1, 2, \dots$. Ко второму типу относятся скачущие орбиты. В ненулевом магнитном поле этот тип подзон образуется всегда и в квазиклассической трактовке описывает дираковские фермионы, движение которых в плоскости перпендикулярной магнитному полю можно представить в виде траекторий, периодически отражающихся от поверхности. Третий тип – это поверхностные подзоны, энергии которых в двух предельных случаях задаются формулой (см. вывод в приложении А):

$$E_{k_z j s} = s \hbar v_s \sqrt{k_z^2 + \frac{(j + \Phi - \gamma_B)^2}{R^2}} + E_0, \quad (1.41)$$

в которой $\Phi = \pi e B R^2 / \hbar c$ – количество квантов магнитного потока, пронизывающих сечение квантовой проволоки, $\gamma_B = 0$ в квазиклассическом пределе $|\kappa R / j| \gg \max(|j|, \Phi)$ (слабые магнитные поля и сильная прижатость ПС к поверхности), $\gamma_B = 1/2$ в пределе сильных магнитных полей ($\Phi \gg |j - 1/2|$, $\Phi \gg \lambda^2 k^2/2$, последнее условие приводит к $|a_0 + 1/a_0| \gg 1$ для спектра (1.41)). При $a_0 > 0$ поверхностные подзоны топологического типа образуются в запрещенной зоне. Это напоминает случай нанопроволоки из топологического изолятора [63, 104]. При $a_0 < 0$ нетопологические поверхностные подзоны

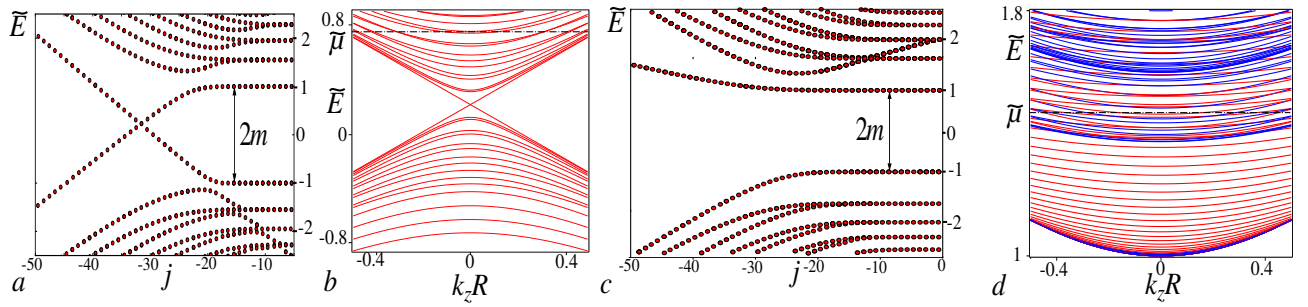


Рис. 1.3. Энергетический спектр массивных дираковских фермионов в нанопроволоке в продольном магнитном поле для двух типов значений граничного параметра a_0 : a , c) Обезразмеренные спектры $\tilde{E} = ER/\hbar c$ одномерных подзон как функции подного углового момента j при $a_0 = 0.8$ (a) и $a_0 = -0.2$ (c). b , d) Спектры одномерных подзон при $a_0 = 0.8$, $j = [-29.5, -21.5]$ (b) и $a_0 = -0.2$, $j = [-51.5, -7.5]$ (d). На рис.1.3 d красные кривые отвечают нетопологическим поверхностным подзонам, синие – подзонам Ландау и скачущих орбит. Для вычислений использовались следующие параметры $\hbar c/\lambda = 0.896m$, $\Phi/\Phi_0 = 35$. Штрих-пунктирная линия на рисунках (b) и (d) обозначает уровень Ферми $\tilde{\mu}$.

формируются на фоне подзон Ландау и скачущих орбит (см. рис.1.3 c). Магнитное поле снимает вырождение по знаку j поверхностных подзон обоих типов. При $a_0 > 0$ периодически по магнитному потоку образуется бесщелевая подзона с линейной дисперсией (см. рис. (1.3 b)). В условиях применимости формулы (1.41) период равен $\hbar c/e$.

Плотность поверхностных состояний, описываемых формулой 1.41, вдали от конической точки $(E - E_0)R/\hbar v \equiv pR \gg 1$ имеет вид (см. Приложение Б):

$$\rho(E) = \rho_0 \left(1 + 2\sqrt{\frac{2}{\pi}} S(E) \right) \Theta \left[(E - E_0) \operatorname{sgn}(a_0(a_0^2 - 1)) + \hbar v k_e \right], \quad (1.42)$$

где $\Theta[\dots]$ – функция Хевисайда, которая определяет область энергий, в которой существуют ПС (при $0 < a_0 \leq 1$ область энергий $E < E_0 + \hbar v k_e$, при $a_0 > 1$ область энергий $E > E_0 - \hbar v k_e$, при $-1 < a_0 < 0$ область энергий $E > E_0 - \hbar v k_e$, и при $a_0 \leq -1$ область энергий $E < E_0 + \hbar v k_e$), $\rho_0 = (E - E_0)/2\pi(\hbar v)^2$ – плотность состояний свободных двумерных безмассовых дираковских фермионов, $k_e = 2|a_0|m/\hbar c|1 - a_0^2|$, $S(E)$ – осциллирующая поправка к плотности состояний ρ_0 за счет периметрического квантования

движения ПС:

$$S(E) = \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{\cos(2\pi pRn - \frac{\pi}{4}) \cos(2\pi n(\Phi - \frac{1}{2} - \gamma_B))}{\sqrt{2\pi pRn}} \quad (1.43)$$

Когда энергии в уравнении (1.43) совпадает с одним из доньев поверхностных подзон, величины $pR \pm (\Phi - 1/2 + \gamma_B)$ стремятся к целым N_{\pm} . В этом случае S (1.43) можно оценить следующим образом (см. [62]):

$$S(\mu) \approx \frac{\Theta(pR \pm (\Phi - \frac{1}{2} - \gamma_B) - N_{\pm})}{2\sqrt{2\pi pR(pR \pm (\Phi - \frac{1}{2} - \gamma_B) - N_{\pm})}}, \quad (1.44)$$

откуда видно, что S расходится корневым образом, как и должно быть для плотности состояний одномерных подзон.

1.4. Вклад в магнитопроводимость квантовой проволоки от поверхностных состояний

В этом разделе мы вычислим электрическую проводимость σ нанопроволоки длиной ℓ в стационарном однородном электрическом поле F . Сначала мы рассмотрим случай $a_0 > 0$, когда уровень Ферми μ находится в запрещенной зоне (см. рис.1.3b). При указанных условиях только ПС дают вклад в проводимость при низких температурах. Мы пренебрежем междолинным рассеянием и рассмотрим слабый случайный потенциал примесей в виде $V(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N u(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i)$ где $u(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i) = U\delta(r-r_i)\delta(\theta-\theta_i)\delta(z-z_i)/r_i$. В расчетах мы будем использовать волновую функцию в квазиклассическом приближении:

$$|j, k_z, s\rangle \approx C_{k_z j} \begin{pmatrix} e^{i(j-1/2)\theta} \\ -\frac{is}{k_z} \sqrt{k_z^2 + \frac{(j+\Phi)^2}{R^2}} e^{i(j+1/2)\theta} \\ \frac{sa_0}{k_z} \sqrt{k_z^2 + \frac{(j+\Phi)^2}{R^2}} e^{i(j-1/2)\theta} \\ ia_0 e^{i(j+1/2)\theta} \end{pmatrix} \frac{e^{\kappa(r-R)+ik_z z}}{\sqrt{2\pi\kappa r}}. \quad (1.45)$$

Мы также предположим, что уровень Ферми μ достаточно удален от E_0 (но, тем не менее, в запрещенной зоне) так, чтобы было заполнено много поверхностных подзон с $s = 1$ ($QR \gg 1$, где $\hbar v Q = \mu - E_0$). В случае слабых примесей достаточно ограничиться τ -приближением в кинетическом уравнении Больцмана и использовать борновское приближение для времени релаксации. Также будем считать, что одномерная длина локализации намного больше длины нанопроволоки. Последнему условию легко удовлетворить в случае заполнения большого числа поверхностных подзон ($QR \gg 1$). Следовательно, мы можем пренебречь специфическими одномерными локализационными эффектами. В рассматриваемом приближении ток вдоль оси z выражается формулой [105]:

$$j_z = -\frac{g_v e^2 F}{\ell} \sum_{\nu} (v_z)_{\nu}^2 \tau_{\nu} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \Big|_{E=E_{\nu}} \right), \quad (1.46)$$

здесь $\nu = \{k_z, j\}$, $(v_z)_{\nu}$ – диагональный матричный элемент оператора скорости эффективного изотропного гамильтониана Дирака, g_v – число неэквивалентных L -долин в зоне Бриллюэна, τ_{ν} – время релаксации в состоянии $|\nu\rangle$, которое выражается формулой:

$$\tau_{\nu}^{-1} = \sum_{\nu'} W_{\nu\nu'} \left(1 - \frac{(v_z)_{\nu'}}{(v_z)_{\nu}} \right). \quad (1.47)$$

В предыдущей формуле вероятность переходов $W_{\nu\nu'}$, усредненная по конфигурациям примесей, выражается формулой:

$$W_{\nu\nu'} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_i \int_0^R \frac{2r_i dr_i}{R^2} \left| \langle \nu | u_{\nu-\nu'}(r) e^{i(j-j')\theta + i(k_z - k'_z)z} | \nu' \rangle \right|^2 \delta(E_{\nu} - E_{\nu'}), \quad (1.48)$$

здесь мы ввели коэффициент Фурье потенциала примеси $u(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$

$$u_{\lambda}(r) = \frac{1}{2\pi\ell} \int_{-\ell/2}^{\ell/2} \int_0^{2\pi} u(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) e^{-im(\theta - \theta_i) - iq(z - z_i)} dz d\theta = \frac{U}{2\pi\ell r_i} \delta(r - r_i), \quad \lambda = \{m, q\}. \quad (1.49)$$

Используя формулу суммирования Пуассона, можно получить следующее уравнение для времени релаксации (1.47) в ведущем порядке по $(pR)^{-1/2}$:

$$\tau_\nu^{-1} = \frac{\pi n_{im} U^2 \kappa}{\hbar R} \rho_0(E_\nu) \frac{\left(2 - \sqrt{2} + \frac{\tilde{j}^2}{\sqrt{2} k_z^2 R^2}\right)}{\left(1 + \frac{\tilde{j}^2}{2 k_z^2 R^2}\right)} \left[1 + \frac{4\sqrt{2} \left(1 + \frac{\tilde{j}^2}{k_z^2 R^2}\right)}{\sqrt{\pi} \left(2 - \sqrt{2} + \frac{\tilde{j}^2}{\sqrt{2} k_z^2 R^2}\right)} S(E) \right], \quad (1.50)$$

где $n_{im} = N/2\pi R\ell$ – двумерная концентрация примесей, $\tilde{j} = j + \Phi - \gamma_B$. Дираковские фермионы, заполняющие ПС, эффективно рассеиваются только теми примесями, которые расположены в слое толщины κ^{-1} у поверхности нанопроволоки. Дополнительный сдвиг фаз в последнем члене формулы (1.50) отражает фазу Берри ПС. В рассматриваемом случае ($pR \gg 1$) сумма в уравнении (1.50) является малой осциллирующей поправкой к незаквантованной плотности ПС ρ_0 . Именно она приводит к осцилляциям Ааронова-Бома в наблюдаемых величинах. Для получения проводимости нанопроволоки необходимо подставить время релаксации (1.50) в (1.46). Опуская громоздкие вычисления, приходим к окончательному результату в ведущем порядке по $(QR)^{-1/2}$:

$$\sigma = \sigma_{2D} 2\pi R [c_1 - c_2 S(\mu)] \quad (1.51)$$

где $c_1 \approx 0.95$, $c_2 \approx 10.6$ и

$$\sigma_{2D} = \frac{e^2 v^2 \hbar R}{\pi n_{imp} U^2 \kappa} \quad (1.52)$$

– стандартная проводимость двумерных безмассовых фермионов, рассеивающихся на короткодействующих примесях при соответствующей замене потенциала $U^2 \kappa / R \rightarrow u_0^2$ [106]. Ряд в (1.51) сходится для всех значений магнитного потока Φ , кроме тех случаев, когда уровень Ферми совпадает с дном одной из поверхностных подзон. Как было показано в предыдущем разделе, это происходит, когда $QR \pm (\Phi - 1/2 - \gamma_B)$ равно целому числу. В этом случае приближение времени релаксации неприменимо даже для слабых примесей. Уравнение (1.51) применимо, когда уровень Ферми достаточно удален от доньев поверхностных подзон, где выполняется условие $S \ll 1$.

Рассмотрим случай $a_0 < 0$. Учитывая переходы только между ПС, можно получить похожий ответ для вклада в проводимость:

$$\delta\sigma = \sigma_{2D} 2\pi R [c_1 - c_2 S(\mu)] \Theta [(\mu - E_0) \operatorname{sgn}(1 - a_0^2) + \hbar v k_e]. \quad (1.53)$$

Функция Хевисайда в этом уравнении означает, что данная поправка к проводимости возникает только тогда, когда уровень Ферми лежит в зоне проводимости или валентной зоне, в зависимости от величины отрицательных значений параметра a_0 (напомним, что при $-1 < a_0 < 0$ ПС лежат в зоне проводимости, при $a_0 < -1$ – в валентной зоне), и пересекает поверхностные подзоны.

Теперь проанализируем ситуацию, когда уровень Ферми лежит в окрестности дираковской точки E_0 при $a_0 \geq 0$. Тогда, при полуцелых Φ , возникают бесщелевые подзоны. Рассеяние назад между ветвями бесщелевых подзон запрещено, так как при этом $W_{\nu\nu'}$ в (1.48) обращается в нуль. Следовательно, в рассматриваемом режиме проводимость нанопроволоки будет периодически осциллировать с периодом Φ_0 и значением в максимуме $g_v e^2/h$ при полуцелых Φ , когда возникают бесщелевые подзоны [63] (в пределе слабых полей) или при целых Φ в пределе сильных полей.

Глава 2

Граничные условия для волновой функции на поверхности топологического изолятора

Эта глава посвящена проблеме граничных условий (ГУ) для эффективных волновых функций, описывающих электронные состояния в топологических изоляторах (ТИ). В первом разделе выводится ГУ для огибающих волновых функций в рамках $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -подхода для 3D ТИ типа $\text{Bi}_2(\text{Se},\text{Te})_3$. Используя полученные ГУ, вычисляются возможные энергетические спектры поверхностных состояний (ПС) вблизи Γ -точки. Также обсуждается связь граничных параметров в выведенном ГУ, с граничным параметром для уравнения Дирака. Во втором разделе рассматривается 2D ТИ в модели сильной связи, описываемой четырьмя орбиталями на каждом узле квадратной решетки с учетом перескоков только между ближайшими соседями. Из условия зануления квантово-механического тока гамильтониана 2D ТИ выводится ГУ для полубесконечной квадратной решетки. Исследуется зависимость энергетического спектра краевых состояний по всей одномерной зоне Бриллюэна от значений граничных параметров в выведенном ГУ.

2.1. Топологические изоляторы типа $\text{Bi}_2(\text{Se},\text{Te})_3$

В этом разделе мы выведем ГУ для $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -гамильтониана в ТИ типа $\text{Bi}_2(\text{Se},\text{Te})_3$ и проанализируем возможные энергетические спектры ПС. Электронные свойства кристаллов типа $\text{Bi}_2(\text{Se},\text{Te})_3$ определяются двумя зонами, подходящими наиболее близко к уровню Ферми в точке Γ , которая является центром зоны Бриллюэна [9, 31]. Поэтому состояния в Γ точке классифицируются по неприводимым представлениям группы D_{3d} , являющейся точечной группой симметрии кристаллической решетки. Мы уже встречались с этой точечной

группой в разделе 1.1 главы 1, где была представлена её таблица характеров необходимых неприводимых представлений. В этой главе мы заменим букву L в названии представления на Γ . Известно [31], что волновые функции зоны проводимости и валентной зоны преобразуется по неприводимым представлениям Γ_6^- , Γ_6^+ соответственно. В разделе 1.1 из соображений симметрии нами уже выведен $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -гамильтониан для двух вырожденных по спину зон, преобразующихся по указанным представлениям. Поэтому здесь мы не будем заново его выводить. Укажем лишь то, что в диагональной части четырехзонного $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -гамильтониана (см. 1.4) симметрией также разрешены члены $b_1\sigma_0k_z^2$ и $b_2\sigma_0(k_x^2 + k_y^2)$, физически учитывающие вклад от исключённых зон. Для ТИ типа $\text{Bi}_2(\text{Se,Te})_3$ квадратичными членами в диагональных элементах пренебрегать нельзя, так как они не малы [31]. Далее мы будем исследовать спектры ПС в рамках изотропного гамильтониана, используемого в теории ТИ:

$$H_{3D}(\mathbf{k}) = m(\mathbf{k})\tau_z \otimes \sigma_0 + v\tau_x \otimes (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}), \quad (2.1)$$

в котором $m(\mathbf{k}) = m_0 + b\mathbf{k}^2$, матрицы σ_i , τ_i ($i = x, y, z$) определяются также как и в разделе 1.1. Гамильтониан (2.1) записан в базисе $\{|\Gamma_6^+ \uparrow\rangle, |\Gamma_6^- \uparrow\rangle, |\Gamma_6^+ \downarrow\rangle, |\Gamma_6^- \downarrow\rangle\}$ и описывает фазу ТИ при условии $m_0b < 0$. Поэтому, следуя работе [31], будем предполагать, что $m_0 < 0$, $b > 0$, $v > 0$. Отметим, что в диагональных членах гамильтониана (2.1) квазиимпульс входит во второй степени. Следовательно, задача нахождения волновых функций и дисперсии ПС для полубесконечного кристалла сводится к решению уравнения второго порядка. Для корректности постановки такой задачи необходимо найти ГУ для четырёхкомпонентной волновой функции на поверхности кристалла. Поиск ГУ мы начнём из общих требований для наблюдаемых величин – а именно, потребуем, чтобы оператор H_{3D} был эрмитовым в ограниченной области пространства. То есть, для произвольных четырёхкомпонентных волновых функций Ψ_1 , Ψ_2 должно быть справедливым равенство:

$\langle \Psi_2 | H_{3D}(-i\hbar\nabla) | \Psi_1 \rangle = \langle \Psi_1 | H_{3D}(-i\hbar\nabla) | \Psi_2 \rangle^*$. Для выполнения условия эрмитовости гамильтониана необходимо зануление поверхностного члена:

$$\left(\frac{\hbar b}{v} [\Psi_2^+ \sigma_0 \otimes \tau_z \partial_{\mathbf{n}} \Psi_1 - (\partial_{\mathbf{n}} \Psi_2^+) \sigma_0 \otimes \tau_z \Psi_1] + i \Psi_2^+ (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \otimes \tau_x \Psi_1 \right) \Big|_S = 0, \quad (2.2)$$

где S – поверхность ТИ. Из условия (2.2) следует, что ГУ можно искать в виде линейной комбинации волновой функции и её нормальной производной:

$$\left(\frac{b}{v} \partial_{\mathbf{n}} \Psi - Q \Psi \right) \Big|_S = 0, \quad (2.3)$$

где Ψ – это четырехкомпонентная огибающая функция, Q – матрица 4×4 , с 16-ю произвольными комплексными параметрами, которые содержат информацию о микроскопической структуре поверхности. Подстановка ГУ (2.3) в условие эрмитовости (2.2) приводит к ограничению на вид Q :

$$\frac{b\hbar}{v} [-\sigma_0 \otimes \tau_z Q + Q^+ \sigma_0 \otimes \tau_z] + i \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \otimes \tau_x = 0 \quad (2.4)$$

Рассмотрим наиболее симметричную поверхность ТИ, которая перпендикулярна направлению $[111]$, совпадающему в выбранной нами системе координат с осью z . В дополнении к симметрии обращения времени, которая задаётся оператором $T = i\sigma_y \otimes \tau_0 K$, эта поверхность обладает пространственной симметрией по отношению к повороту на угол $\pm 2\pi/3$ вокруг оси z , описываемую матрицей $R_3(z) = e^{i\sigma_z \otimes \tau_0 \pi/3}$, а также плоскостью зеркального отражения, перпендикулярную оси x и задаваемую матрицей $M_x = i\sigma_x \otimes \tau_z$. Поэтому мы можем потребовать, чтобы ГУ также учитывало существование указанных симметрий. Это приводит ещё к трём ограничениям на вид матрицы Q :

$$Q = TQT^{-1}, Q = R_3(z)QR_3(z)^{-1}, Q = M_xQM_x^{-1}. \quad (2.5)$$

В результате, матрица Q определяется всего лишь тремя действительными граничными параметрами q_1, q_2, q_3 :

$$Q = \begin{pmatrix} q_1 & iq_2 + \frac{i}{2} & 0 & 0 \\ iq_2 - \frac{i}{2} & q_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & q_1 & -iq_2 - \frac{i}{2} \\ 0 & 0 & -iq_2 + \frac{i}{2} & q_3 \end{pmatrix}. \quad (2.6)$$

В рамках $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -теории эти параметры являются феноменологическими и должны определяться либо из первопринципных расчётов, либо из сравнения с экспериментальными данными, например, для спектров ПС. ГУ типа (2.3) были также получены в работе [46]. Однако матрица, учитывающая поверхностный потенциал в работе [46], аналогичная матрице Q , содержит 16 комплексных параметров, так как авторы не учитывали симметричные свойства поверхности (111).

Далее в этом разделе мы будем изучать зависимость дисперсии ПС в ТИ, занимающем полупространство $z \geq 0$, от значений граничных параметров в матрице Q . Мы рассмотрим случай, когда матрица Q (2.6) зависит от значений двух параметров q_1 и q_2 , а $q_3 = -q_1$. Такой выбор значений граничных параметров приводит к новым результатам, которые не содержатся в работе [46] и являются частью положений, выносимых на защиту. Задача нахождения спектра ПС сводится к решению стационарного уравнения Шредингера $H_{3D}\Psi = E\Psi$ с ГУ (2.3). Трансляционная инвариантность поверхности позволяет искать волновую функцию ПС в виде суммы частных решений $\sim e^{-\kappa z + ik_x x + ik_y y}$. После подстановки в уравнение Шредингера, получим два двукратно вырожденных корня характеристического уравнения:

$$\kappa_{1,2}(k_{\parallel}, E) = \frac{1}{\sqrt{2b}} \sqrt{v^2 + 2b^2 k_{\parallel}^2 + 2m_0 b \mp \sqrt{v^4 + 4v^2 m_0 b + 4E^2 b^2}}. \quad (2.7)$$

Тогда общее решение, отвечающее ПС, можно представить в виде суммы:

$$\Psi = h_{11}(k_{\parallel}, E)e^{-\kappa_1 z} + h_{12}(k_{\parallel}, E)e^{-\kappa_1 z} + h_{21}(k_{\parallel}, E)e^{-\kappa_2 z} + h_{22}(k_{\parallel}, E)e^{-\kappa_2 z}, \quad (2.8)$$

в котором векторные части функции Ψ выражаются следующим образом:

$$h_{j1}(k_{\parallel}, E) = \begin{pmatrix} m_0 + bk_{\parallel}^2 - b\kappa_i^2 + E \\ -iv\kappa_j \\ 0 \\ v(k_x + ik_y) \end{pmatrix}, h_{j2}(k_{\parallel}, E) = \begin{pmatrix} v(k_x - ik_y) \\ 0 \\ -iv\kappa_j \\ -(m_0 + bk_{\parallel}^2 - b\kappa_i^2 + E) \end{pmatrix}, \quad (2.9)$$

где $j = 1, 2$, $k_{\parallel} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$. После подстановки волновой функции (2.8) в ГУ (2.3), (2.6) (с параметрами $q_3 = -q_1 = -q$) получим дисперсионное уравнение:

$$\begin{aligned} & -v^4\kappa_1^2\kappa_2^2(q_2^2 - \frac{1}{4}) + v^4k_{\parallel}^2 \left[(q_2^2 - q^2 - \frac{1}{4})^2 + \kappa_1^2\kappa_2^2 - q^2(\kappa_1^2 + \kappa_2^2) \right] - v^4k_{\parallel}^4(q_2^2 - \frac{1}{4}) + \\ & + v^2\kappa_1\kappa_2 \left[(q_2 - \frac{1}{2})F_+ + (q_2 + \frac{1}{2})F_- \right] - F_+F_- + \\ & v^2k_{\parallel}^2 \left[-\frac{v^2}{b}(q_2^2 - \frac{1}{4}) \left(2m_0 + \frac{v^2}{b} \right) + \right. \\ & + v(\kappa_1\kappa_2 - q^2 + (q_2^2 - \frac{1}{4})) \left(2q_2E + \frac{v}{b}(\tilde{m} - E + b\kappa_1\kappa_2 + \frac{v^2}{b}) \right) - \\ & \left. - vq(\kappa_1 + \kappa_2) \left(2q_2\tilde{m} - \frac{v}{b}(\tilde{m} + E) + (v - 2bq_2)(\kappa_1^2 + \kappa_2^2 - \kappa_1\kappa_2) \right) \right] = 0, \end{aligned} \quad (2.10)$$

в котором $\tilde{m} = m_0 + bk_{\parallel}^2$ и

$$\begin{aligned} F_{\pm} = & \frac{v^2}{b}(q_2 \mp \frac{1}{2})(m_0 \pm E) \mp \\ & \left[\frac{v^2}{b}(q_2^2 - q_1^2 - \frac{1}{4} + \frac{b^2}{v^2}\kappa_1\kappa_2)(\tilde{m} \pm E + b\kappa_1\kappa_2) \pm vq_1(\kappa_1 + \kappa_2)(\tilde{m} \pm E - b\kappa_1\kappa_2) \right]. \end{aligned} \quad (2.11)$$

При $k_{\parallel} = 0$ дисперсионное уравнение определяет положение точки Дирака в спектре ПС (см. рис. 2.1). При больших по модулю значениях q точка Дирака стремится к середине запрещенной зоны. Это согласуется с тем, что ГУ в пределе больших q переходит в нулевое, для которого спектр ПС обладает симметрией частица-дырка и имеет вид $E = \pm vk_{\parallel}$ [9, 31]. Если учесть малые поправки к нулевому ГУ (т.е. $|q| \gg \max(1, (|m_0|b/v^2)^{1/2}, |q|)$), то симметрия частица-дырка снимется и дополнительно появляется кривизна спектра:

$$E = \pm |v|k_{\parallel} + \frac{2}{q}(m_0 + bk_{\parallel}^2). \quad (2.12)$$

Если параметр q_2 является самым большим в ГУ, то дисперсия ПС снова

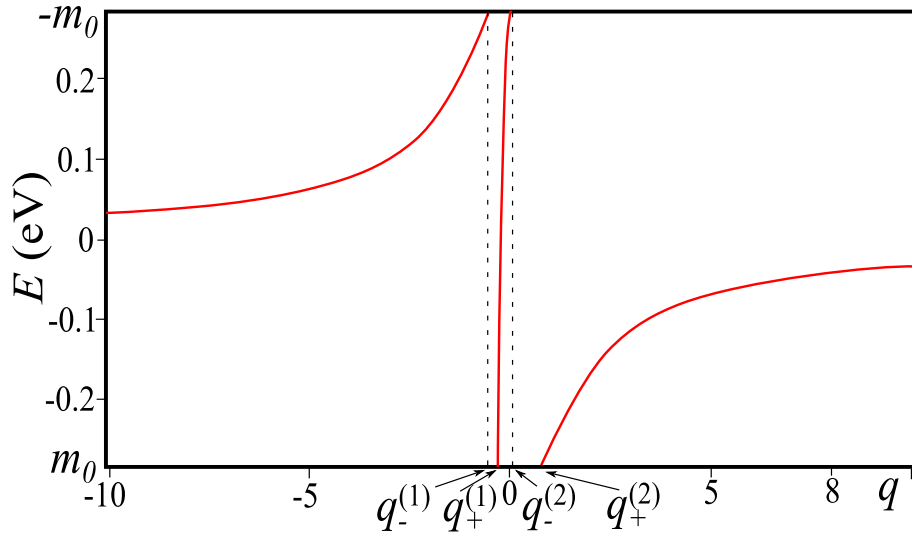


Рис. 2.1. Типичная зависимость положения точки Дирака $E(k_{\parallel} = 0)$ в спектре ПС от значения граничного параметра q , при $q_2 = 1.3$, $m_0 = -0.28\text{эВ}$, $v = 4\text{эВ}\cdot\text{А}$, $b = 6.86\text{эВ}\cdot\text{А}^2$.

определяется формулой (2.12), в которой нужно заменить $q \rightarrow q_2$. Рассмотрим дисперсионное уравнение (2.10), когда параметры граничного условия становятся одного порядка с параметром характеризующим объемную зонную структуру $(|m_0|b/v^2)^{1/2}$. В интервале значений параметра q : $q_-^{(1)} < q < q_+^{(1)}$, $q_-^{(2)} < q < q_+^{(2)}$ точка Дирака отсутствует в запрещенной зоне. Границы интервалов определяются так:

$$\begin{aligned} q_-^{(1,2)} &= -\sqrt{\frac{m_0 b}{2v^2} + \frac{1}{4}} \mp \sqrt{\frac{m_0 b}{2v^2} + \frac{1}{4} + \left(q_2 + \frac{1}{2}\right)^2} \\ q_+^{(1,2)} &= \sqrt{\frac{m_0 b}{2v^2} + \frac{1}{4}} \mp \sqrt{\frac{m_0 b}{2v^2} + \frac{1}{4} + \left(q_2 - \frac{1}{2}\right)^2} \end{aligned} \quad (2.13)$$

Типичный энергетический спектр ПС для значений q в промежутке $q_-^{(1)} < q < q_+^{(1)}$ представлен на рисунке (2.2). Характерной особенностью этих спектров является отсутствие точки Дирака в центре запрещенной зоны. В дополнение к этому, энергии ПС не всегда пересекают запрещенную зону в окрестности точки Γ (см. красную и черную кривые на рис. (2.2)). Поскольку область применимости $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -метода ограничена областью малых отклонений квазиимпульса от центра запрещенной зоны, мы не можем узнать поведение спектра ПС по всей зоне Бриллюэна в рамках рассмотренного выше подхода и проверить всегда ли работает соответствие "объем-граница". Ниже мы выйдем из

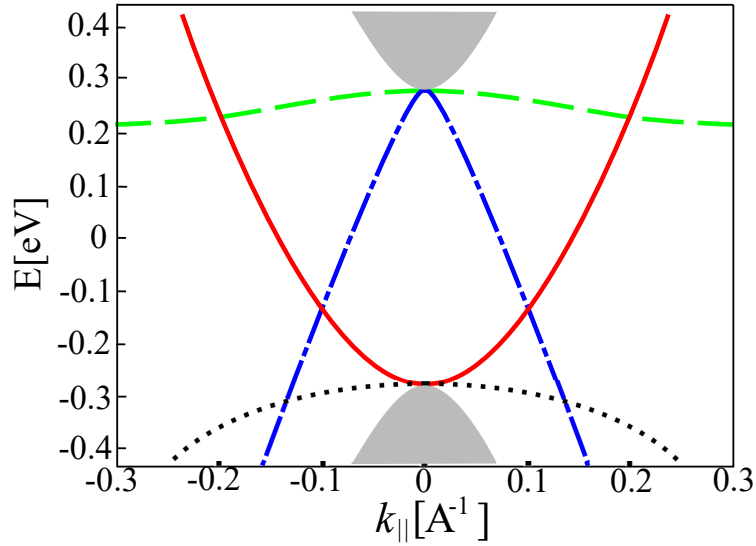


Рис. 2.2. Энергетический спектр ПС в ТИ типа Bi_2Se_3 при следующих значениях параметров $m_0 = -0.28\text{эВ}$, $v = 4\text{эВ}\cdot\text{А}$, $b = 6.86\text{эВ}\cdot\text{А}^2$, $q_2 = 0.5$, $q_3 = -q_1$ и четырех значениях q_1 : $q_1 = -1.27$ (зеленая пунктирная линия), $q_1 = 0.79$ (синяя штрих-пунктирная линия), $q_1 = 0$ (красная сплошная линия), $q_1 = 0.44$ (черная точечная линия). При рассматриваемых значениях граничных параметров в спектре ПС отсутствует точка Дирака, а также их энергии, как функции компонент квазиимпульса вдоль поверхности, не всегда пересекают запрещенную зону в окрестности Γ точки, где применим гамильтониан (2.1).

этого затруднения, рассмотрев 2D ТИ в модели сильной связи, что позволит исследовать зависимость спектра краевых состояний от значений граничных параметров по всей зоне Бриллюэна.

Ниже в этом разделе устанавливается связь между граничными параметрами q_1, q_2, q_3 и a_0 в пределе $b \rightarrow 0$, физически это означает, что можно не учитывать вклад от исключенных из $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -гамильтониана зон. В этом пределе волновая функция ПС (2.8) состоит из суммы медленно спадающей экспоненты с $\kappa_1 = \sqrt{m_0 + v^2 k_{\parallel}^2 - E^2}$ и быстро спадающей экспоненты с $\kappa_2 = v/b$. Первая экспонента отвечает волновой функции ПС для уравнения Дирака, рассмотренного в разделе 1.2 главы 1. Вторая экспонента вносит вклад только в узкой приповерхностной области, что можно учесть в виде дополнительного вклада в ГУ для волновой функции ПС, определяющейся первой экспонентой. Для того чтобы найти связь параметров матрицы Q с a_0 , мы сделаем

пределный переход $b \rightarrow 0$ в уравнении (2.10), считая $|q_{1,2,3}| \gg b\kappa_1/v$. Тогда в нулевом порядке по b мы получим спектр ПС уравнения Дирака (1.25):

$$E = \pm \frac{2a_0 v \hbar}{1 + a_0^2} k_{\parallel} + m_0 \frac{1 - a_0^2}{1 + a_0^2}, \quad (2.14)$$

в котором параметр a_0 выражается через q_1, q_2, q_3 следующим образом:

$$a_0 = \frac{(2q_2 + 1)^2 + 4q_3(q_1 - 1)}{(2q_2 - 1)^2 - 4q_1(q_3 - 1)}. \quad (2.15)$$

Таким образом, в этом разделе мы предложили ГУ для огибающих волновых функций 3D ТИ типа $\text{Bi}_2(\text{Se}, \text{Te})_3$, которое описывает симметричную поверхность (111) всего тремя действительными граничными параметрами. Было показано, что спектр ПС может не иметь стандартной конической дисперсии, а также, что существует область в пространстве граничных параметров, когда энергия ПС как функция квазиимпульса не пересекает запрещенную зону в окрестности Γ -точки, что, вообще говоря, не противоречит соотношению "объем-граница" (bulk-boundary correspondence) в ТИ. Для того чтобы это доказать, мы рассмотрим далее 2D ТИ в модели сильной связи и будем исследовать зависимость спектров краевых состояний от значений граничных параметров по всей одномерной зоне Бриллюэна.

2.2. Двумерный топологический изолятор в модели

сильной связи

В настоящем разделе исследуется зависимость спектра краевых состояний в 2D ТИ от общих граничных условий в модели сильной связи, предложенной в работе [107]. Рассмотрим двумерную квадратную решетку, с четырьмя орбиталями $|s, \uparrow\rangle, (1/\sqrt{2})|p_x + ip_y, \uparrow\rangle, |s, \downarrow\rangle, -(1/\sqrt{2})|p_x - ip_y, \downarrow\rangle$ на каждом узле. $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ обозначают состояния с проекцией спина вверх, вниз на ось перпендикулярную плоскости двумерной решетки. Мы будем предполагать, что в объеме спин-орбитальное взаимодействие отсутствует. Тогда

гамильтониан для электрона со спином вверх в рассматриваемом бесконечном двумерном кристалле можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned}
H_{\uparrow} = & (m - 4b) \sum_i [c_{p_i}^+ c_{p_i} - c_{s_i}^+ c_{s_i}] + \\
& + b \sum_i \left[e^{-i\theta_i^\mu} c_{p_{i+\mu}}^+ c_{p_i} + h.c. \right] - b \sum_i \left[e^{-i\theta_i^\mu} c_{s_{i+\mu}}^+ c_{s_i} + h.c. \right] - \\
& - \frac{v}{2} \sum_i \left[e^{-i\theta_i^x} c_{s_{ix+1}}^+ c_{p_i} - e^{i\theta_i^x} c_{s_{ix-1}}^+ c_{p_i} + i e^{-i\theta_i^y} c_{s_{iy+1}}^+ c_{p_i} - i e^{i\theta_i^y} c_{s_{iy-1}}^+ c_{p_i} - h.c. \right],
\end{aligned} \tag{2.16}$$

где m, b, v – действительные параметры модели, $i = (x_i, y_i)$ – индекс, нумерующий узлы решетки, $c_{p(s)_i}$ – оператор уничтожения электрона со спином вверх в состоянии $p(s)$ на узле с номером i , $i + \mu = i_\mu + 1$, θ_i^μ – $U(1)$ калибровочное поле, $\mu = x, y$. Гамильтониан для электронов с проекцией спина вниз связан симметрией по отношению к инверсии времени с H_{\uparrow} (2.16) и получается, если взять комплексное сопряжение от H_{\uparrow} и дополнительно заменить знаки на противоположные в слагаемых, содержащих произведения $c_p^+ c_s$ или $c_s^+ c_p$. Гамильтониан (2.16) описывает фазу ТИ при значениях параметров $0 < m/2b < 4$ [27]. Энергетический спектр разрешенных состояний бесконечной двумерной решетки имеет вид:

$$\varepsilon(k_x, k_y) = \pm \sqrt{(m_0 + 2b(\cos k_x + \cos k_y - 2))^2 + v^2(\sin^2 k_x + \sin^2 k_y)}. \tag{2.17}$$

Рассмотрим теперь полубесконечную двумерную решётку, занимающую полуплоскость $x \geq 0$. Далее нам будет удобно работать с четырёхкомпонентным оператором $\Psi_i = (c_{\uparrow s_i}, c_{\uparrow p_i}, c_{\downarrow s_i}, c_{\downarrow p_i})^T$, который уничтожает электрон на i -ом узле. Для того, чтобы найти спектр краевых состояний, необходимо вывести ГУ для волновой функции. Вид ГУ определяется условием зануления квантово-механического тока в направлении перпендикулярном границе $x = 0$. Для гамильтониана (2.16) ток по оси x определяется следующим выражением:

$$j_i^x = \left. \frac{\delta H}{\delta \theta_i^x} \right|_{\theta_i^x=0} = -ib \left[\Psi_i^\dagger \sigma_0 \otimes \tau_z \Psi_{x_i+1, y_i} - h.c. \right] + \frac{v}{2} \left[\Psi_i^\dagger \sigma_z \otimes \tau_y \Psi_{x_i+1, y_i} + h.c. \right] \tag{2.18}$$

Из вида оператора тока (2.18) следует, что ГУ для четырёхкомпонентной волновой функции можно искать в виде:

$$\left(-ib\sigma_0 \otimes \tau_z + \frac{v}{2}\sigma_z \otimes \tau_y\right) \psi_{1,0} = G\psi_0, \quad (2.19)$$

в котором ψ_i - четырёхкомпонентная функция, составленная из амплитуд вероятности нахождения электрона на одной из четырёх орбиталей на узле с номером i , G - матрица 4×4 , которая отвечает за смешивание орбиталей на границе из-за резкого обрыва кристаллического потенциала. Матрица G содержит, вообще говоря, 16 неизвестных комплексных граничных параметров. Нетрудно заметить, что условие зануления тока на границе $j_{0,y_i}^x = 0$ накладывает ограничение на матрицу G : $G = -G^+$. При этом, если дополнительно потребовать, чтобы ГУ оставалось инвариантным относительно инверсии времени и зеркального отражения в плоскости перпендикулярной оси y , то мы получим ещё два ограничения на вид матрицы G :

$$\begin{aligned} TGT^{-1} &= -G, \\ M_yGM_y^{-1} &= G, \end{aligned} \quad (2.20)$$

где $T = i\sigma_y \otimes \tau_z K$ - оператор инверсии времени, $M_y = i\sigma_y \otimes \tau_z$ - оператор зеркальной симметрии. Матрица G , удовлетворяющая условиям (2.20) и антиэрмитовости $G = -G^+$, имеет вид:

$$G = i \begin{pmatrix} g_1 & g_2 & 0 & g_3 \\ g_2 & g_4 & g_3 & 0 \\ 0 & g_3 & g_1 & -g_2 \\ g_3 & 0 & -g_2 & g_4 \end{pmatrix}, \quad (2.21)$$

где $g_{1,2,3,4}$ действительные граничные параметры, отвечающие за смешивание функций на границе.

Для простоты мы будем рассматривать границу, которая не запутывает состояния с разными спинами (т.е. $g_3 = 0$ в (2.21)). Тогда задача разбивается на два независимых блока. Волновая функция краевого состояния

обладает комплексным импульсом $k_x = k + iq$, но действительным собственным значением энергии. Используем метод аналитического продолжения для нахождения частных решений уравнения $H_{\uparrow}\psi = E\psi$, отвечающим краевым состояниям. Соотношение между энергией E и волновым вектором k_y , параллельным краю, определяющее аналитическое продолжение зонной структуры (2.17), удовлетворяют уравнению: $\text{Im}(\varepsilon(k + iq, k_y)) = 0$. Последнее уравнение имеет три решения, называемые реальными линиями: $k = 0$, $k = \pi$, $\cos k \cosh q = 2bm_0 + 2b(\cos k_y - 2)/(v^2 - 4b^2)$. Первые две реальные линии отвечают энергиям, лежащим в объёмной запрещенной зоне рассматриваемой двумерного кристалла. Поэтому далее в разложении общего решения с энергией в запрещенной зоне по частным решениям мы будем учитывать только решения с $k = 0, \pi$. Следовательно, общее решение для краевых состояний со спином вверх есть:

$$\psi_{x_i} = C_1 \begin{pmatrix} -E - M_1 \\ -v(\sinh q_1 - \sin k_y) \end{pmatrix} e^{-q_1 x_i + i k_y y_i} + C_2 \begin{pmatrix} -E - M_2 \\ v(\sinh q_2 + \sin k_y) \end{pmatrix} e^{i \pi x_i - q_2 x_i + i k_y y_i} \quad (2.22)$$

где $M_{1,2} = m_0 + 2b(\pm \cosh q_{1,2} + \cos k_y - 2)$, C_1, C_2 – произвольные постоянные, соотношение между которыми находится из ГУ (2.19). Глубины локализации частных решений в (2.22) определяются соотношениями:

$$\cosh q_{1,2} = \frac{\pm(2bm_0 + 4b^2(\cos k_y - 2))}{v^2 - 4b^2} + \frac{\sqrt{v^2(m_0 + 2b(\cos k_y - 2))^2 + (v^2 - 4b^2)(v^2(\sin^2 k_y + 1) - E^2)}}{v^2 - 4b^2}. \quad (2.23)$$

Дисперсионное уравнение для краевых состояний со спином вверх получается после подстановки (2.22) в (2.19) и последующего разрешения системы

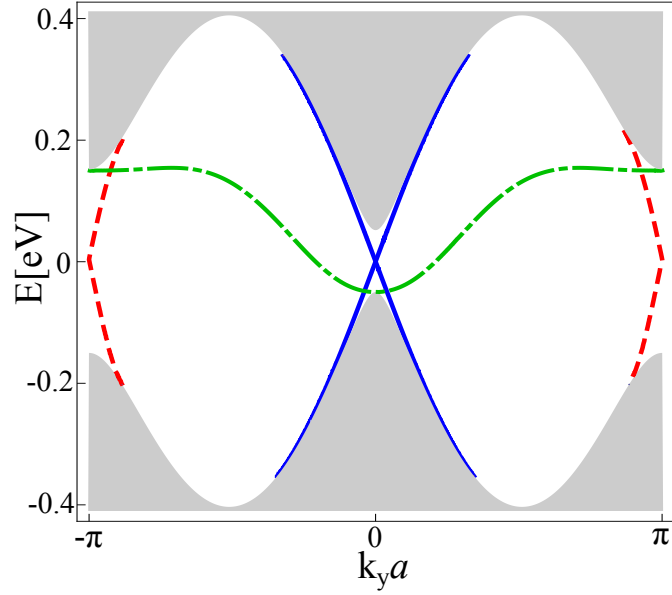


Рис. 2.3. Электронный спектр полубесконечной двумерной квадратной решетки. Серым цветом закрашена область объёмных решений. Дисперсия краевых состояний показана жирными цветными кривыми. Каждый цвет отвечает разным значениям граничных параметров. Синие кривые отвечают нулевому граничному условию $g_1 = \infty$, $g_4 = \infty$, $g_2 = g_3 = 0$. Красным кривым соответствуют значения $g_1 = 0.1$, $g_2 = 0.5$, $g_4 = g_3 = 0$. Зелёные кривые получены для значений $g_1 = -0.05$, $g_4 = \infty$, $g_2 = g_3 = 0$.

относительно коэффициентов C_1 , C_2 :

$$\begin{aligned}
& [(g_1 - Be^{-q_1})(E + M_1) - 2v(\sinh q_1 - \sin k_y)(ve^{-q_1} + g_2)] \times \\
& \times [(g_2 - ve^{-q_2})(E + M_2) + 2v(\sinh q_2 + \sin k_y)(g_4 - Be^{-q_2})] + \\
& [(ve^{-q_1} - g_2)(E + M_1) + 2v(\sinh q_1 - \sin k_y)(Be^{-q_1} + g_4)] \times \\
& \times [(Be^{-q_2} + g_1)(E + M_2) - 2v(\sinh q_1 + \sin k_y)(ve^{-q_2} - g_2)] = 0.
\end{aligned} \tag{2.24}$$

Дисперсионное уравнение для состояний со спином вниз можно получить из (2.24) заменой $k_y \rightarrow -k_y$. На рисунке (2.3) представлены типичные спектры краевых состояний для обеих проекций спина при разных значениях граничных параметров. Он демонстрирует, что главное свойство ТИ – существование нечётного числа пар краевых состояний для всех энергий в запрещенной зоне – не зависит от значений граничных параметров. Это и является главным результатом данного раздела.

Глава 3

Краевые состояния в наноперфорированном графене

В этой главе рассмотрена задача о вычислении вклада в поглощение наноперфорированного графена, обусловленного переходами между уровнями энергий краевых состояний, локализованных вблизи нанодоверстий в графене. В разделе (3.1) вычисляется спектр краевых состояний вблизи одного нанодоверстия. В разделе (3.2) вычисляется внутрizonная часть поглощения наноперфорированного графена при его освещении циркулярно поляризованным излучением.

3.1. Спектр краевых состояний вблизи единичного нанодоверстия в графене

В разделе 3 Введения было указано, что электроны в долинах K и K' в графене описываются эффективным уравнением Вейля-Дирака, которое в сокращенном виде выглядит так:

$$v(\sigma_x p_x + \sigma_y p_y) \psi_\tau = \varepsilon \psi_\tau, \quad (3.1)$$

где индекс $\tau = +1(-1)$ соответствует долине $K(K')$, $\psi_\tau = (\psi_{1\tau}, \psi_{2\tau})$ – двухкомпонентная огибающая волновая функция электронов в долине с индексом τ , ε – энергия электронов, отсчитанная от точки вырождения зон (точки Дирака). Долины K и K' связаны симметрией инверсии времени. Нанодоверстия мы будем описывать внутридолинным граничным условием (ГУ), упомянутым в Обзоре литературы (см. (18)), которое в случае нанодоверстия в графене записывается следующим образом:

$$[\psi_{1\tau} + i\tau a^\tau e^{-i\varphi} \psi_{2\tau}]_{r=R} = 0, \quad (3.2)$$

где φ – полярный угол, R – радиус наноотверстия, под a нужно понимать усредненное по периметру наноотверстия значение граничного параметра. Граничное условие (3.2) записано в системе координат, в которой радиус-вектор отсчитывается от центра наноотверстия. В силу аксиальной симметрии рассматриваемой системы собственные значения $j = \pm 1/2, \pm 3/2, \pm 5/2, \dots$ оператора проекции полного момента на ось перпендикулярную плоскости графена ($j_z = \sigma_0(-i\partial_\varphi) + \sigma_z/2$) являются квантовыми числами задачи. Волновую функцию состояния со значением проекции полного углового момента j можно искать в виде:

$$\psi_j = \begin{pmatrix} f_1(r)e^{i(j-1/2)\varphi} \\ f_2(r)e^{i(j+1/2)\varphi} \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

После подстановки волновой функции (3.3) в уравнение (3.1) следует, что радиальные функции $f_{1,2}$ удовлетворяют уравнению Бесселя. В силу того, что в графене спектр объемных состояний является непрерывным, вблизи наноотверстия не могут образовываться истинно локализованные состояния с дискретным спектром. Однако, граничное условие (3.2) эквивалентно некоторому связывающему потенциалу [15] вблизи края наноотверстия, из которого электрон может выбраться в объем, протуннелировав через барьер. Следовательно, состояния, локализованные вблизи наноотверстия, должны иметь конечное время жизни. Поэтому, мы будем искать решения, отвечающие уходящим волнам на бесконечность, подобно тому, как это было предложено Гамовым для объяснения альфа-распада [108]. Такое ГУ на бесконечности позволит нам найти уровни энергии квазистационарных краевых состояний. Расходящимся цилиндрическим волнам в рассматриваемой задаче отвечают функции Ганкеля $H_n^{(1,2)}(z)$. Для состояний в зоне проводимости уходящая на бесконечность волна описывается функцией $H_n^{(1)}(z)$, для валентной зоны – $H_n^{(2)}(z)$. Следовательно, волновая функция с определенной энергией и полным

угловым моментом j запишется следующим образом:

$$\psi_j = \begin{pmatrix} H_{j-1/2}(kr)e^{i(j-1/2)\varphi} \\ isH_{j+1/2}(kr)e^{i(j+1/2)\varphi} \end{pmatrix}, \quad (3.4)$$

где $k = s\varepsilon/\hbar v$, $s = \text{sgn}(\text{Re}(\varepsilon))$, $H_{j\pm 1/2} = H_{j\pm 1/2}^{(1)}(kr)$ при $\text{Re}\varepsilon > 0$, $H_{j\pm 1/2} = H_{j\pm 1/2}^{(2)}(kr)$ при $\text{Re}\varepsilon < 0$. Подставляя двухкомпонентную функцию (3.4) в граничное условие (3.2), приходим к дисперсионному уравнению, определяющему спектр квазистационарных краевых состояний:

$$H_{j-1/2}(kR) - \tau a^\tau H_{j+1/2}(kR) = 0. \quad (3.5)$$

В низкоэнергетическом пределе $kR \ll 1$ ($|aj| \ll 1$) из уравнения (3.5) получаем следующий спектр:

$$\varepsilon_{j,\tau} = \tau \left(j - \frac{1}{2} \right) (\text{sgn}(a)\hbar\omega_0 - \Delta_j) - i\gamma_j, \quad (3.6)$$

здесь эквидистантная часть спектра определяется частотой $\omega_0 = 2|a|v/R$, малая неэквидистантная поправка равна:

$$\Delta_j = \frac{2a^3(j-1/2) [1 - (j-1/2)\delta_{|j|,3/2}]}{(j-3/2)}, \quad (3.7)$$

где $\delta_{|j|,3/2}$ – символ Кронеккера. Малое, но конечное обратное время жизни краевого состояния равно:

$$\gamma_j = \frac{2\pi\hbar v}{R} \frac{(|a(j-1/2)|)^{2|j-1/2|+1}}{\Gamma(|j-1/2|)\Gamma(|j-1/2|+1)}, \quad (3.8)$$

где $\Gamma(x)$ – гамма-функция. Применимость спектра краевых состояний (3.6) определяется условиями $|\varepsilon_{j\tau}|R/\hbar v \ll 1$; $|a(j-1/2)| \ll 1$; $\tau(j-1/2) > 0$; $|j| = 3/2, 5/2, 7/2, \dots$, при которых энергии квазистационарных состояний хорошо определены в силу $\text{Re}\varepsilon_{j\tau} \gg \text{Im}\varepsilon_{j\tau}$. Спектры квазистационарных краевых состояний в двух долинах при $a < 0$ приведены на рисунке (3.1).

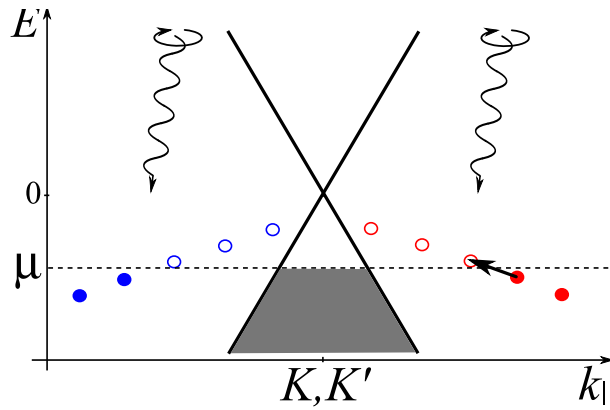


Рис. 3.1. Квазиклассическая зависимость энергий квазистационарных краевых состояний в графене с одним отверстием от заквантованной тангенциальной компоненты квазиимпульса ($k_{||} = (j - 1/2)/R$) в схеме приведенных долин при $a < 0$. Красным цветом отмечены квазистационарные уровни в долине K , синим – K' . Под уровнем Ферми μ находятся заполненные делокализованные (серый фон) и краевые состояния (закрашенные кружки). Циркулярно поляризованное по часовой стрелке излучение приводит к переходам с изменением $j \rightarrow j - 1$, поэтому только переход (показан жирной стрелкой) между краевыми состояниями из красной долины приводит к резонансу в поглощении.

3.2. Поглощение циркулярно поляризованного излучения наноперфорированным графеном

Рассмотрим одно нанотверстие радиуса R в бесконечном графене и построим полную систему функций задачи рассеяния. Так как нас будет интересовать только внутризонное поглощение, то мы для определенности будем рассматривать зону с отрицательными энергиями ε_k . Для наших целей удобно будет ввести систему функций задачи рассеяния, которая характеризуется определенным асимптотическим поведением: на бесконечности имеется плоская волна $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ с волновым вектором $\mathbf{k} = [|\varepsilon_k|/\hbar v](\cos \vartheta, \sin \vartheta)$ и расходящаяся от нанотверстия цилиндрическая волна. В цилиндрических координатах точная волновая функция задачи рассеяния имеет вид (в этом разделе для удобства записи волновой функции будем использовать орбитальный момент

$l = j - 1/2$ вместо j):

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \begin{pmatrix} J_l(kr) + C_{l\tau}(k)H_l^{(2)}(kr) \\ -i \left[J_{l+1}(kr) + C_{l\tau}(k)H_{l+1}^{(2)}(kr) \right] e^{i\varphi} \end{pmatrix} i^l e^{-i\vartheta l + i l \varphi} \quad (3.9)$$

Здесь $k = |\varepsilon_k|/\hbar v$, члены с функцией Бесселя J_l описывают разложение плоской волны по функциям с орбитальным моментом l , а члены с функцией Ганкеля $H_l^{(2)}$ – расходящейся цилиндрической волны. Коэффициенты $C_{l\tau}(k)$ определяются из граничного условия (3.2)

$$C_{l\tau}(k) = -\frac{J_l(kR) + \tau a^\tau J_{l+1}(kR)}{H_l^{(2)}(kR) + \tau a^\tau H_{l+1}^{(2)}(kR)} \quad (3.10)$$

Вместе с функциями (3.9) для вычисления матричных элементов переходов нам понадобятся функции $\psi_{\mathbf{k}}^{(-)}$, которые отвечают на бесконечности плоской волне $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ и сходящейся на антиточку цилиндрической волне [109]. Они получаются из (3.9) заменой $C_l \rightarrow C_l^*$ и $H_l^{(2)} \rightarrow H_l^{(1)}$. Обе системы функций $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}$ и $\psi_{\mathbf{k}}^{(-)}$ полны и нормированы на дельта-функцию

$$\int_R^{+\infty} r dr \int_0^{2\pi} d\varphi \psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)+} \psi_{\mathbf{k}'}^{(\pm)} = (2\pi)^2 \frac{\delta(k - k')}{k} \delta(\vartheta - \vartheta'). \quad (3.11)$$

Пусть на графен по нормали падает слабое циркулярно поляризованное по часовой стрелке излучение, электрическое поле которого равно:

$\mathbf{F} = F(\cos \omega t, -\sin \omega t, 0)$. Вводя в уравнение (3.1) взаимодействие электронов в графене с излучением через вектор-потенциал $\mathbf{A} = -c \int \mathbf{F} dt$, получим член, описывающий переходы в непрерывном спектре:

$$V = v \frac{e}{c} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} = \frac{eFv}{2\omega} (-i\sigma_x - \sigma_y) e^{i\omega t} + \frac{eFv}{2\omega} (i\sigma_x - \sigma_y) e^{-i\omega t} \equiv V_1 e^{i\omega t} + V_2 e^{-i\omega t} \quad (3.12)$$

В этом уравнении V_1 описывает испускание фотона, а член V_2 поглощение (при $\omega > 0$). Вероятность перехода в единицу времени равна

$$dw_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{(1,2)} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{k}' | V_{1,2} | \mathbf{k} \rangle|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} \pm \hbar\omega) \frac{d^2 k'}{(2\pi)^2}, \quad (3.13)$$

где знак $+(-)$ отвечает индексу 1(2), $|\mathbf{k}\rangle \equiv \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}$, $\langle \mathbf{k}'| \equiv \psi_{\mathbf{k}'}^{(-)\dagger}$, матричный элемент выражается формулой:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}'|V_1|\mathbf{k}\rangle &= \\ &= \frac{4evF e^{i\vartheta}}{\omega(k^2 - k'^2)\pi R^2 k k'} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i(\vartheta' - \vartheta)l} (kR + \tau 2a^\tau (l+1) + a^{2\tau} k'R)}{\left[H_l^{(2)}(k'R) + \tau a^\tau H_{l+1}^{(2)}(k'R) \right] \left[H_{l+1}^{(2)}(kR) + \tau a^\tau H_{l+2}^{(2)}(kR) \right]} \end{aligned} \quad (3.13)$$

Матричный элемент $\langle \mathbf{k}'|V_2|\mathbf{k}\rangle$ получается из (3.14) заменой $k \leftrightarrow k'$.

Определим безразмерный коэффициент поглощения $\alpha(\omega)$ как мощность, диссипируемую единицей площади наноперфорированного графена, нормированную на полный падающий поток:

$$\alpha(\omega) = \frac{U(\omega)}{\Omega S}, \quad (3.15)$$

где Ω – площадь листа графена, $S = cF^2 \sqrt{\kappa}/4\pi$ – модуль вектора Пойнтинга падающего излучения, κ – эффективная диэлектрическая проницаемость системы. Диссипируемая мощность выражается через вероятности переходов формулой:

$$U(\omega) = N_a \hbar \omega \iint \left[\frac{d^2 k}{(2\pi)^2} dw_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{(2)} f(\mathbf{k})(1 - f(\mathbf{k}')) - \frac{d^2 k'}{(2\pi)^2} dw_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{(1)} f(\mathbf{k}')(1 - f(\mathbf{k})) \right] \quad (3.16)$$

в которой считается, что вклады от переходов на каждом нанотверстии независимы, N_a – число нанотверстий, $f(\mathbf{k})$ – функция Ферми-Дирака для состояний в валентной зоне. Формула (3.16) справедлива при малой концентрации нанотверстий $n_a R^2 \ll 1$ ($n_a = N_a/\Omega$). Подставляя (3.16) в (3.15), получим окончательную формулу для внутризонного вклада в коэффициент поглощения перфорированного графена:

$$\begin{aligned} \alpha(\omega) &= \frac{32g_s n_a e^2 v^2 \left(\frac{\hbar v}{R}\right)^2}{\pi^2 \omega c} \int_0^{+\infty} d\varepsilon \left\{ \frac{f(-\varepsilon - \hbar\omega) - f(-\varepsilon)}{\varepsilon(\varepsilon + \hbar\omega)((\varepsilon + \hbar\omega)^2 - \varepsilon^2)^2} \right\} \times \\ &\times \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \frac{(\varepsilon + \hbar\omega + \tau 2a^\tau \hbar v(l+1)/R + a^{2\tau} \varepsilon)^2}{\left| H_l^{(2)}(kR) + \tau a^\tau H_{l+1}^{(2)}(kR) \right|^2 \left| H_{l+1}^{(2)}(kR + \omega R/v) + \tau a^\tau H_{l+2}^{(2)}(kR + \omega R/v) \right|^2} \end{aligned} \quad (3.17)$$

где $g_s = 2$ – фактор спинового вырождения в графене. Зависимость поглощения от частоты для различных значений температуры и уровня Ферми приведена на рис.3.2. Оба знаменателя в сумме по l в (3.17) малы, когда энергия ε_k состояния $|\mathbf{k}\rangle$ соответствует действительной части $l+1$ -го квазистационарного краевого уровня (3.6), и, одновременно, $\varepsilon_k + \hbar\omega$ равно действительной части энергии l -го квазистационарного уровня. Фактически это условие резонанса в поглощении. Для рассматриваемой поляризации (по часовой стрелке) и валентной зоны указанное условие выполнено только в одной из долин $\tau = +1$ при $l \geq 1$, $a < 0$, так как энергии квазистационарных краевых состояний в этой долине уменьшаются с ростом l (см. рис. 3.1). При смене направления поляризации резонанс в поглощении появляется, когда ε_k соответствует энергии $l-1$ -го уровня краевого состояния, а $\varepsilon_k + \hbar\omega$ энергии l -го уровня краевого состояния. Это условие выполнено только в долине $\tau = -1$ при $l \leq -1$, $a < 0$, так как смена направления поляризации эквивалентна инверсии времени – симметрии, связывающей две долины. В пределе $\omega \rightarrow 0$ коэффициент поглощения (3.17) следует друдевскому поведению ω^{-2} в чистой системе ($\omega\tau = \infty$).

В низкоэнергетическом пределе $kR \ll 1$ коэффициент поглощения (3.17) удобно переписать в следующем виде:

$$\alpha(\omega) = \sum_{l=1}^{l_{max}} \alpha_l^{(res)}(\omega, T) + Z(\omega, T), \quad (3.18)$$

здесь $Z(\omega, T)$ – плавная функция частоты, парциальный резонансный член имеет вид:

$$\alpha_l^{(res)}(\omega, T) = \frac{\sinh\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right)}{\cosh\left(\frac{\text{Re}(\varepsilon_{l+1,+1}) - \mu}{T} + \frac{\hbar\omega}{2T}\right) + \cosh\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right)} \times \\ \times \frac{8\sqrt{\pi}g_s n_a e^2 v^2}{\omega c} \frac{(l+1)a^2 \gamma_l}{l [\hbar^2(\omega - \omega_l)^2 + \gamma_l^2]}. \quad (3.19)$$

Резонансная частота в формуле (3.19) определяется выражением:

$$\omega_l = \text{Re}(\varepsilon_{l,+1} - \varepsilon_{l+1,+1}) / \hbar = \omega_0 [1 - a^2(1 + 4\delta_{11})] \quad (3.20)$$

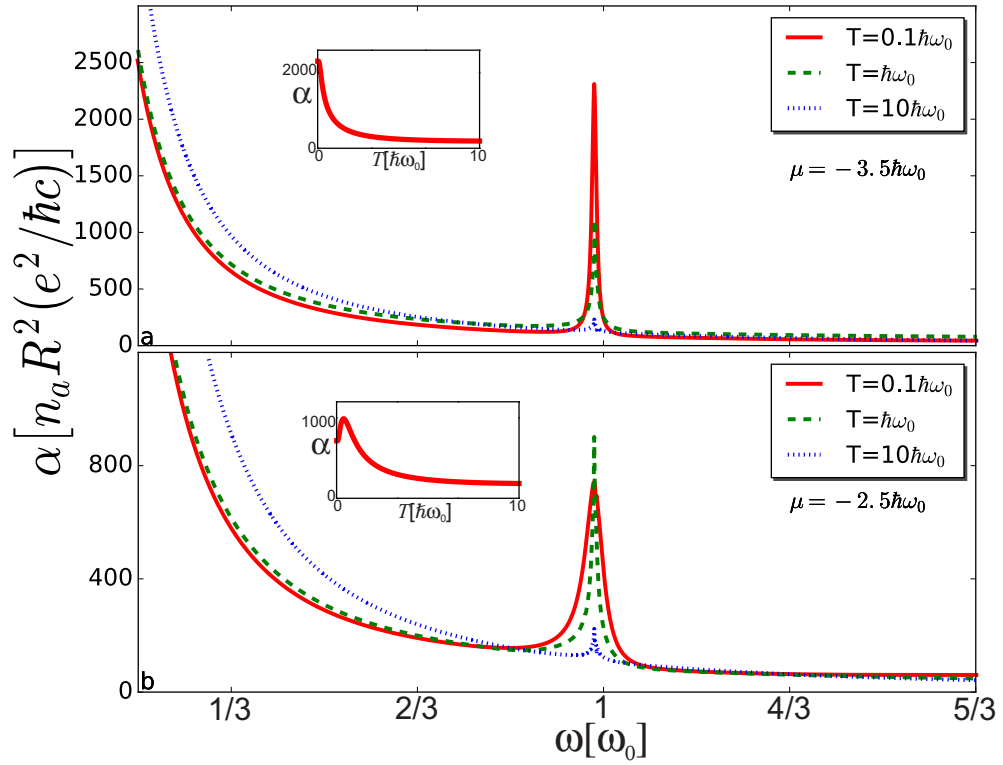


Рис. 3.2. Коэффициент поглощения, определяемый формулой (3.17), как функция частоты при $a = -0.15$ и уровнях Ферми $\mu = -3.5\hbar\omega_0$ (рис.3.2а), $\mu = -2.5\hbar\omega_0$ (рис. 3.2b). Резонансная частота согласно (3.20) равна $\omega_{res} \approx 0.99\omega_0 \approx 5$ ТГц при $R = 10$ нм. На левых вставках показаны зависимости амплитуды резонанса от температуры для соответствующих значений уровня Ферми.

Формулы (3.19), (3.20) применимы при $|al| \lesssim 1$, откуда возникает оценка числа резонансных членов в (3.18): $|l_{max}| \sim 1/|a|$, что приводит к ограничению на положения уровня Ферми μ относительно точки Дирака, при которых возможно наблюдение резонанса: $|\mu| \lesssim \hbar\omega_0/2|a|$. Из формулы (3.19) видно, что вклад в сумму от l -го члена на резонансной частоте пропорционален времени жизни квазистационарного краевого состояния ($\propto 1/\gamma_l$), которое, согласно (3.8), увеличивается с ростом l . На рис. 3.3 приведена зависимость величины коэффициента поглощения на резонансной частоте от положения уровня Ферми для четырёх характерных температур. Видно, что при низких температурах поглощение является ступенчатой функцией уровня Ферми. В этом пределе ($T \ll \hbar\omega_0$) амплитуда резонанса определяется тем членом $\alpha_l^{(res)}$ в сумме (3.18), для которого $f(\text{Re}\varepsilon_{l,+1}) \approx 0$ и $f(\text{Re}\varepsilon_{l,+1} - \hbar\omega) \approx 1$. С увеличением температуры в поглощение на резонансной частоте вносят всё больший вклад члены с большими l . Так на рис.3.2b при температуре $T = 0.1\hbar\omega_0$ резонанс определяется членом с номером $l = 2$ в формуле (3.18). При увеличении температуры на порядок ($T = \hbar\omega_0$), дополнительный вклад даёт член с $l = 3$, что приводит к росту резонансного максимума и уменьшению его ширины (т.к. $\gamma_2 \gg \gamma_3$). Дальнейший рост температуры приводит к понижению максимального значения (см. вставку на рис. 3.2b). Иная ситуация представлена на рис. 3.2a, на котором при температурах, много меньших энергии резонанса, вклад в поглощение на резонансной частоте определяется членом в сумме (3.18) с номером $l = 3$ (при $\mu = -3.5\hbar\omega_0$). Его вклад в поглощение является главным для рассматриваемого значения $a = -0.15$, так как он в не менее чем в 3 раза превосходит вклады от остальных членов (см. рис.3.3). Поэтому ширина линии резонанса не зависит от температуры, а значение в максимуме убывает с ростом последней (см. вставку на рис. 3.2a). Различие в температурных зависимостях амплитуды резонанса на рис. 3.2a и 3.2b определяется конкуренцией двух факторов. С одной стороны, с ростом температуры разность фермиевских функций распределения уменьшается, и поглощение

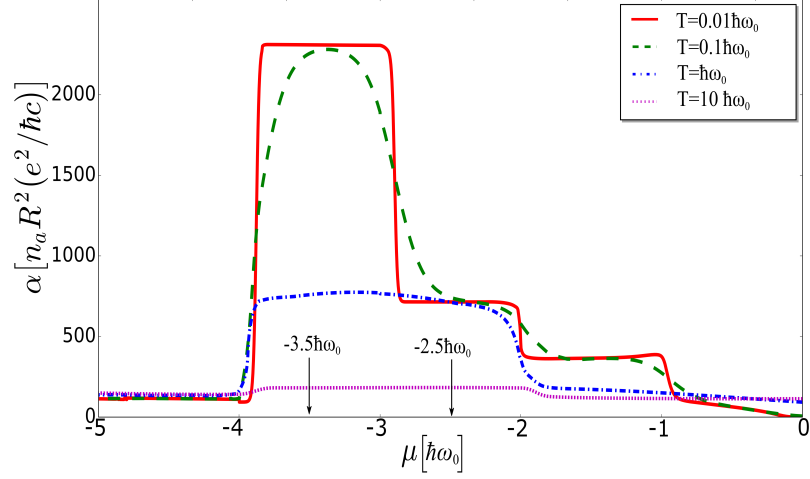


Рис. 3.3. Зависимость величины поглощения на резонансной частоте $\omega_{res} = 0.99\omega_0$ от положения уровня Ферми при $a = -0.15$.

падает с ростом T . С другой стороны появляются дополнительные вклады в амплитуду резонанса, связанные с соседними резонансными переходами. Поэтому реализация монотонной или немонотонной температурной зависимости амплитуды резонанса сложным образом зависит от параметров системы.

Зависимость величины поглощения на резонансной частоте от положения уровня Ферми, представленная на рис. 3.3, демонстрирует возможность управления величиной отклика в резонансе при помощи затвора. При низких температурах и достижимых на опыте [95] значений концентрации антиточек $n_a R^2 = 2 \cdot 10^{-3}$ абсолютное значение коэффициента поглощения может достигать нескольких процентов (для $a = -0.15$ и $-4\hbar\omega_0 \lesssim \mu \lesssim -3\hbar\omega_0$), что по величине сопоставимо с плазмонным откликом графеновых структур [110]. При высоких температурах ($T \gg \hbar\omega_0, \mu$) коэффициент поглощения спадает как $1/T$ (см. левые вставки на рис. 3.2).

Заключение

Основные результаты работы заключаются в следующем:

1. Найдены электронные спектры в нанопроволоке, описываемой эффективным изотропным трехмерным уравнением Дирака с однопараметрическим граничным условием, удовлетворяющим требованиям эрмитовости и симметрии инверсии времени задачи. Знак параметра в граничном условии определяет тип спектра поверхностных подзон. При положительных значениях граничного параметра поверхностные подзоны формируются в объемной запрещенной зоне, как в нанопроволоках из топологических изоляторов. При отрицательных значениях граничного параметра поверхностные подзоны образуются на фоне размерно-квантованных состояний в отсутствие магнитного поля. Включение продольного магнитного поля приводит к появлению осциллирующего по магнитному потоку вклада в плотность поверхностных состояний и магнитопроводимость для обоих типов спектра поверхностных подзон. Фаза осцилляций изменяется от π в слабых магнитных полях до 2π в пределе сильных полей.
2. Выведено ГУ для огибающих функций в 3D ТИ типа $\text{Bi}_2(\text{Se}, \text{Te})_3$. Пространственные симметрии поверхности (111) и симметрия по отношению к инверсии времени позволяют сократить число феноменологических параметров в ГУ до трех. Показано, что в общем случае ПС не имеют конической дисперсии.
3. Рассмотрен вопрос о спектрах краевых состояний в 2D ТИ, описываемых в модели сильной связи четырьмя орбиталями на каждом узле квадратной решетки. Показано, что общее инвариантное относительно инверсии времени граничное условие не нарушает соответствие "объем-граница" в 2D ТИ.

4. Предсказано, что коэффициент поглощения наноперфорированного графена имеет резонанс на частотах, соответствующих расстоянию между ближайшими уровнями энергий краевых состояний, локализованных вблизи каждого наноотверстия. Амплитудное значение коэффициента поглощения на резонансной частоте, будучи сложной функцией параметров системы (уровня Ферми, температуры), может достигать нескольких процентов для реально достижимых концентраций наноотверстий в листе графена. Для отверстий нанометрового диаметра резонансная частота лежит в терагерцовом диапазоне. При освещении циркулярно поляризованным излучением резонанс в поглощении возникает только в одной из долин из-за долинной асимметрии спектра краевых состояний.

Список сокращений и условных обозначений

ГУ — граничное условие

ПС — поверхностные состояния

ТИ — топологический изолятор

ТКИ — топологический кристаллический изолятор

Список литературы

1. Зи С. Физика полупроводниковых приборов. Кн.2, гл.8. 1981.
2. Novoselov K. S., Geim A. K., Morozov S. V. et al. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films // Science. 2004. Vol. 306. P. 666.
3. Tamm I. A possible kind of electron binding on crystal surfaces // Phys. Z. Sowjetunion. 1932. Vol. 1. P. 733.
4. Shockley W. On the Surface States Associated with a Periodic Potential // Phys. Rev. 1939. Vol. 56, no. 4. Pp. 317–323.
5. Peres N. M. R., Guinea F., Neto A. H. C. Electronic properties of disordered two-dimensional carbon // Phys. Rev. B. 2006. Vol. 73, no. 12. P.125411.
6. Kane C. L., Mele E. J. Z₂ Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect // Phys. Rev. Lett. 2005. Vol. 95, no. 14. P. 146802.
7. Hasan M. Z., Kane C. L. Colloquium: Topological insulators // Rev. Mod. Phys. 2010. Vol. 82. P. 3045.
8. Qi X. L., Zhang S. C. Topological insulators and superconductors // Rev. Mod. Phys. 2011. Vol. 83. P. 1057.
9. Zhang H., Liu C.-X., Qi X.-L. et al. Topological insulators in Bi₂Se₃, Bi₂Te₃ and Sb₂Te₃ with a single Dirac cone on the surface // Nature Physics. 2009. Vol. 5. P. 438.
10. Zeljkovic I., Okada Y., Serbyn M. et al. Dirac mass generation from crystal symmetry breaking on the surfaces of topological crystalline insulators // Nature Materials. 2015. Vol. 14, no. 3. Pp. 318–324.
11. Egorova S. G., Chernichkin V. I., Ryabova L. I. et al. Detection of highly conductive surface electron states in topological crystalline insulators Pb_{1-x}Sn_xSe using laser terahertz radiation // Sci. Rep. 2015. Vol. 5. P. 11540.
12. **Еналдиев, В. В.**, Волков В. А. Осцилляции Ааронова-Бома,

- обусловленные нетопологическими поверхностными состояниями в дираковских нанопроволоках // Письма в ЖЭТФ. 2016, Т.104, №11, С.806–812.
13. **Enaldiev, V. V.**, Zagorodnev I. V., Volkov V. A. Boundary Conditions and Surface State Spectra in Topological Insulators // Письма в ЖЭТФ. 2015, Т.101, №2, С.94–100.
 14. **Еналдиев, В. В.**, Волков В. А. Резонансное поглощение терагерцового излучения в наноперфорированном графене // Письма в ЖЭТФ. 2016, Т.104, №9, С.546–650.
 15. Zagorodnev I. V., Devizorova Z. A., **Enaldiev, V. V.** Resonant electron scattering by a graphene antidot // Phys. Rev. B. 2015. Vol. 92, no. 19. P. 195413.
 16. Волков В. А., **Еналдиев, В. В.** Поверхностные состояния системы дираковских фермионов: минимальная модель // ЖЭТФ. 2016, Т.149, №3, С.702–716.
 17. Volkov V. A., **Enaldiev, V. V.**, Zagorodnev I. V. Quantum antidot in graphene // Proceedings of 18-th International Symposium "Nanostructures: Physics and Technology". 2010. P. 92.
 18. **Enaldiev, V. V.**, Zagorodnev I. V., Volkov V. A. Effect of surface potential on topological surface states // Book of Abstracts. Workshop "New trends in topological insulators". 2014. P. 58.
 19. **Enaldiev, V. V.**, Zagorodnev I. V., Volkov V. A. Interface effect on surface and edge states in Topological insulators // Proceedings of 22-nd International Symposium "Nanostructures: Physics and Technology". 2014. P. 146.
 20. **Еналдиев, В. В.**, Волков В. А. Размерное квантование и таммовские состояния массивных дираковских фермионов в квантовой проволоке // Труды 18-го Международного симпозиума "Нанопфизика и нанофотоника". Vol. 2. 2014, Т.2, С.486. P. 468.
 21. **Еналдиев, В. В.**, Загороднев И. В., Фролов А. В., Волков В. А.

- Размерное квантование и проводимость дираковских фермионов в висмутовых нанопроволоках // Сборник трудов 15-ой Школы молодых ученых "Актуальные проблемы физики". 2014, С.114.
22. **Еналдиев, В. В.**, Волков В. А. Поверхностные состояния в висмутовой нанопроволоке // Тезисы докладов 12-ой Российской конференции по физике полупроводников. 2015, С.41.
 23. **Enaldiev, V. V.**, Volkov V. A. Resonance optical absorption in nanoperoforated graphene // Graphene Week 2016 Abstract Book. 2016. P. 229.
 24. **Enaldiev, V. V.**, Volkov V. A. Response of nanoperoforated graphene in terahertz range // The Joint Conference of New Trends on Topological Insulators and 17-th International Conference on Narrow Gap Systems. 2016. P. 130.
 25. Thouless D. J., Kohmoto M., Nightingale M. P., den Nijs M. Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential // Phys. Rev. Lett. 1982. Vol. 49, no. 6. Pp. 405–408.
 26. Soumyanarayanan A., Reyren N., Fert A., Panagopoulos C. Emergent phenomena induced by spin-orbit coupling at surfaces and interfaces // Nature. 2016. Vol. 539, no. 7630. Pp. 509–517.
 27. Fu L., Kane C. L. Topological insulators with inversion symmetry // Phys. Rev. B. 2007. Vol. 76, no. 4. P. 045302.
 28. Isaev L., Moon Y. H., Ortiz G. Bulk-boundary correspondence in three-dimensional topological insulators // Phys. Rev. B. 2011. Vol. 84, no. 7.
 29. Hsieh D., Xia Y., Qian D. et al. A tunable topological insulator in the spin helical Dirac transport regime // Nature Physics. 2009. Vol. 460. P. 1101.
 30. Hsieh D., Xia Y., Qian D. et al. Observation of Time-Reversal-Protected Single-Dirac-Cone Topological-Insulator States in Bi_2Te_3 and Sb_2Te_3 // Phys. Rev. Lett. 2009. Vol. 103. P. 146401.
 31. Liu C.-X., Qi X.-L., Zhang H. et al. Model Hamiltonian for topological insulators // Phys. Rev. B. 2010. Vol. 82. P. 045122.

32. Egger R., Zazunov A., Yeyati A. L. Helical Luttinger Liquid in Topological Insulator Nanowires // *Phys. Rev. Lett.* 2010. Vol. 105, no. 13. P. 136403.
33. Shan W.-Y., Lu H.-Z., Shen S.-Q. Effective continuous model for surface states and thin films of three-dimensional topological insulators // *New Journal of Physics.* 2010. Vol. 12, no. 4. P. 043048.
34. Silvestrov P. G., Brouwer P. W., Mishchenko E. G. Spin and charge structure of the surface states in topological insulators // *Phys. Rev. B.* 2012. Vol. 86, no. 7. P. 075302.
35. Giraud S., Kundu A., Egger R. Electron-phonon scattering in topological insulator thin films // *Phys. Rev. B.* 2012. Vol. 85, no. 3. P. 035441.
36. Imura K.-I., Yoshimura Y., Takane Y., Fukui T. Spherical topological insulator // *Phys. Rev. B.* 2012. Vol. 86, no. 23. P. 235119.
37. Linder J., Yokoyama T., Sudbø A. Anomalous finite size effects on surface states in the topological insulator Bi₂Se₃ // *Phys. Rev. B.* 2009. Vol. 80, no. 20. P. 205401.
38. Takane Y., Imura K.-I. Dirac Electrons on a Sharply Edged Surface of Topological Insulators // *Journal of the Physical Society of Japan.* 2012. Vol. 81, no. 9. P. 093705.
39. Kong D., Cha J. J., Lai K. et al. Rapid Surface Oxidation as a Source of Surface Degradation Factor for Bi₂Se₃ // *ACS Nano.* 2011. Vol. 5, no. 6. Pp. 4698–4703.
40. Valla T., Pan Z.-H., Gardner D. et al. Photoemission Spectroscopy of Magnetic and Nonmagnetic Impurities on the Surface of the Bi₂Se₃ Topological Insulator // *Phys. Rev. Lett.* 2012. Vol. 108, no. 11. P. 117601.
41. Wray L. A., Xu S.-Y., Xia Y. et al. A topological insulator surface under strong Coulomb, magnetic and disorder perturbations // *Nature Physics.* 2010. Vol. 7, no. 1. Pp. 32–37.
42. Scholz M. R., Sánchez-Barriga J., Marchenko D. et al. Tolerance of Topological Surface States towards Magnetic Moments: Fe on Bi₂Se₃ //

- Phys. Rev. Lett. 2012. Vol. 108, no. 25. P. 256810.
43. Wang E., Tang P., Wan G. et al. Robust Gapless Surface State and Rashba-Splitting Bands upon Surface Deposition of Magnetic Cr on Bi₂Se₃ // Nano Letters. 2015. Vol. 15, no. 3. Pp. 2031–2036.
 44. Jenkins G. S., Schmadel D. C., Sushkov A. B. et al. Dirac cone shift of a passivated topological Bi₂Se₃ interface state // Phys. Rev. B. 2013. Vol. 87, no. 15. P. 155126.
 45. Park J., Soh Y.-A., Aeppli G. et al. Crystallinity of tellurium capping and epitaxy of ferromagnetic topological insulator films on SrTiO₃ // Sci. Rep. 2015. Vol. 5. P. 11595.
 46. Men'shov M., Tugushev V., Chulkov E. Engineering near-surface electron states in three-dimensional topological insulators // Письма в ЖЭТФ. 2013, Т.98, №10, С.676.
 47. Fu L. Topological Crystalline Insulators // Phys. Rev. Lett. 2011. Vol. 106, no. 10. P. 106802.
 48. Hsieh T. H., Lin H., Liu J. et al. Topological crystalline insulators in the SnTe material class // Nature Communications. 2012. Vol. 3. P. 982.
 49. Liu J., Duan W., Fu L. Two types of surface states in topological crystalline insulators // Phys. Rev. B. 2013. Vol. 88, no. 24. P. 241303(R).
 50. Xu S.-Y., Liu C., Alidoust N. et al. Observation of a topological crystalline insulator phase and topological phase transition in Pb_{1-x}Sn_xTe // Nature Communications. 2012. Vol. 3. P. 1192.
 51. Dziawa P., Kowalski B. J., Dybko K. et al. Topological crystalline insulator states in Pb_{1-x}Sn_xSe // Nature Materials. 2012. Vol. 11. P. 1023.
 52. Zhang F., Kane C. L., Mele E. J. Surface states of topological insulators // Phys. Rev. B. 2012. Vol. 86, no. 8. P. 081303(R).
 53. Волков Б. А., Панкратов О. А. Безмассовые двумерные электроны в инверсном контакте // Письма в ЖЭТФ. 1985, Т.42, №4, С.145-148.
 54. Dimmock J. O., Wright G. B. Band Edge Structure of PbS, PbSe, and

- PbTe // Phys. Rev. 1964. Vol. 135, no. 3A. Pp. A821–A830.
55. Dimmock J. O., Melngailis I., Strauss A. J. Band Structure and Laser Action in $\text{Pb}_x\text{Sn}_{1-x}\text{Te}$ // Phys. Rev. Lett. 1966. Vol. 16, no. 26. Pp. 1193–1196.
 56. Witten E. Dynamical Breakinf of Supersymmetry // Nucl. Phys. B. 1981. Vol. 185. Pp. 513–554.
 57. Aitchison I. J. R. Supersymmetry in Particle Physics. An Elementary Introduction. Cambridge University Press, 2007.
 58. Волков В. А., Идлис Б. Г., Усманов М. Ш. Приграничные состояния в неоднородных полупроводниковых структурах // УФН. 1995. Т. 165, № 7. С. 799–810.
 59. Волков В. А., Пинскер Т. Н. Спиновое расщепление электронного спектра в ограниченных кристаллах с релятивистской зонной структурой // ФТТ. 1981, Т.23, С.1756.
 60. Альтшулер Б. Л., Аронов А. Г., Спивак Б. З. Эффект Ааронова - Бома в неупорядоченных проводниках // Письма в ЖЭТФ. 1981, Т.33, №2, С.101. no. 2.
 61. Брандт, Н. Б. Гицу Д. В., Николаева А. А., Пономарев Я. Г. Размерные осцилляции продольного магнитосопротивления тонких цилиндрических монокристаллов висмута // Письма в ЖЭТФ. 1976, Т.24, №5, С.304.
 62. Ioselevich A. S. Oscillations of magnetoresistance in a clean hollow cylinder with fluctuating radius // Письма в ЖЭТФ. 2015, Т.101, №5, С.390. no. 5.
 63. Bardarson J. H., Brouwer P. W., Moore J. E. Aharonov-Bohm Oscillations in Disordered Topological Insulator Nanowires // Phys. Rev. Lett. 2010. Vol. 105. P. 156803.
 64. Biswas R. R., Balatsky A. V. Impurity-induced states on the surface of three-dimensional topological insulators // Phys. Rev. B. 2010. Vol. 81, no. 23. P. 233405.

65. Abanin D. A., Pesin D. A. Ordering of Magnetic Impurities and Tunable Electronic Properties of Topological Insulators // *Phys. Rev. Lett.* 2011. Vol. 106, no. 13. P. 136802.
66. Zyuzin A. A., Hook M. D., Burkov A. A. Parallel magnetic field driven quantum phase transition in a thin topological insulator film // *Phys. Rev. B.* 2011. Vol. 83, no. 24. P. 245428.
67. Raghu S., Chung S. B., Qi X.-L., Zhang S.-C. Collective Modes of a Helical Liquid // *Phys. Rev. Lett.* 2010. Vol. 104, no. 11. P. 116401.
68. Li Q., Ghosh P., Sau J. D. et al. Anisotropic surface transport in topological insulators in proximity to a helical spin density wave // *Phys. Rev. B.* 2011. Vol. 83, no. 8. P. 085110.
69. Gao J.-H., Yuan J., Chen W.-Q. et al. Giant Mesoscopic Spin Hall Effect on the Surface of Topological Insulator // *Phys. Rev. Lett.* 2011. Vol. 106, no. 5. P. 057205.
70. Lee D.-H. Surface States of Topological Insulators: The Dirac Fermion in Curved Two-Dimensional Spaces // *Phys. Rev. Lett.* 2009. Vol. 103, no. 19. P. 196804.
71. Tse W.-K., MacDonald A. H. Magneto-optical and magnetoelectric effects of topological insulators in quantizing magnetic fields // *Phys. Rev. B.* 2010. Vol. 82, no. 16. P. 161104(R).
72. Tkachov G., Hankiewicz E. M. Anomalous galvanomagnetism, cyclotron resonance, and microwave spectroscopy of topological insulators // *Phys. Rev. B.* 2011. Vol. 84, no. 3. P. 035405.
73. Peng H., Lai K., Kong D. et al. Aharonov–Bohm interference in topological insulator nanoribbons // *Nature Materials.* 2009. Vol. 9. P. 225.
74. Xiu F., He L., Wang Y. et al. Manipulating surface states in topological insulator nanoribbons // *Nature Nanotechnology.* 2011. Vol. 6, no. 4. P. 216.
75. Castro Neto A. H., Guinea F., Peres N. M. R. et al. The electronic proper-

- ties of graphene // *Rev. Mod. Phys.* 2009. Vol. 81. P. 109.
76. Wallace P. The Band Theory of Graphite // *Phys. Rev.* 1947. Vol. 71. P. 622.
77. Slonczewski J. C., Weiss P. R. Band Structure of Graphite // *Phys. Rev.* 1958. Vol. 109, no. 2. P. 272.
78. McCann E., Fal'ko V. I. Symmetry of boundary conditions of the Dirac equation for electrons in carbon nanotubes // *Journal of Physics: Condensed Matter.* 2004. Vol. 16, no. 13. P. 2371.
79. Akhmerov A. R., Beenakker C. W. J. Boundary conditions for Dirac fermions on a terminated honeycomb lattice // *Phys. Rev. B.* 2008. Vol. 77, no. 8. P. 085423.
80. Nakada K., Fujita M., Dresselhaus G., Dresselhaus M. S. Edge state in graphene ribbons: Nanometer size effect and edge shape dependence // *Phys. Rev. B.* 1996. Vol. 54. P. 17954.
81. Katsnelson M. I. *Graphene.* Cambridge University Pr., 2012.
82. Brey L., Fertig H. A. Edge states and the quantized Hall effect in graphene // *Phys. Rev. B.* 2006. Vol. 73, no. 19. P. 195408.
83. Fujita M., Wakabayashi K., Nakada K., Kusakabe K. Peculiar Localized State at Zigzag Graphite Edge // *Journal of the Physical Society of Japan.* 1996. Vol. 65, no. 7. P. 1920.
84. Волков В. А., Загороднев И. В. Электроны близи края графена // *ФНТ.* 2009, Т.35, №1, С.5.
85. Basko D. M. Boundary problems for Dirac electrons and edge-assisted Raman scattering in graphene // *Phys. Rev. B.* 2009. Vol. 79, no. 20.
86. Tkachov G. Dirac fermion quantization on graphene edges: Isospin-orbit coupling, zero modes, and spontaneous valley polarization // *Phys. Rev. B.* 2009. Vol. 79, no. 4. P. 045429.
87. van Ostaay J. A. M., Akhmerov A. R., Beenakker C. W. J., Wimmer M. Dirac boundary condition at the reconstructed zigzag edge of graphene //

- Phys. Rev. B. 2011. Vol. 84. P. 195434.
88. Загороднев И. В. Краевые электронные возбуждения в графене и 2D топологическом изоляторе на основе квантовых ям Cd(Hg)Te: Кандидатская диссертация / Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН. 2016.
 89. Maksimov P. A., Rozhkov A. V., Sboychakov A. O. Localized electron states near the armchair edge of graphene // Phys. Rev. B. 2013. Vol. 88, no. 24. P. 245421.
 90. Li W., Tao R. Edge States of Monolayer and Bilayer Graphene Nanoribbons // Journal of the Physical Society of Japan. 2012. Vol. 81, no. 2. P. 024704.
 91. Wimmer M., Akhmerov A. R., Guinea F. Robustness of edge states in graphene quantum dots // Phys. Rev. B. 2010. Vol. 82, no. 4. P. 045409.
 92. Ritter K. A., Lyding J. W. The influence of edge structure on the electronic properties of graphene quantum dots and nanoribbons // Nature Materials. 2009. Vol. 8, no. 3. P. 235.
 93. Tao C., Jiao L., Yazyev O. V. et al. Spatially resolving edge states of chiral graphene nanoribbons // Nature Physics. 2011. Vol. 7, no. 8. P. 616.
 94. Baringhaus J., Edler F., Tegenkamp C. Edge-states in graphene nanoribbons: a combined spectroscopy and transport study // Journal of Physics: Condensed Matter. 2013. Vol. 25, no. 39. P. 392001.
 95. Латышев Ю. И., Орлов А. П., Фролов А. В. et al. Орбитальное квантование в системе краевых дираковских фермионов в наноперфорированном графене // Письма в ЖЭТФ. 2013, Т.98, №4, С.242. Vol. 98, no. 4. P. 242.
 96. Koster G. Space Groups and Their Representations. Massachusetts Institute of Technology, Cambridge. Massachusetts, 1957.
 97. Liu Y., Allen R. E. Electronic structure of the semimetals Bi and Sb // Phys. Rev. B. 1995. Vol. 52. Pp. 1566–1577.

98. Falicov L. M., Golin S. Electronic Band Structure of Arsenic. I. Pseudopotential Approach // *Phys. Rev.* 1965. Vol. 137. Pp. A871–A882.
99. Wolff P. A. Matrix elements and selection rules for the two-band model of bismuth // *J. Phys. Chem. Solids.* 1964. Vol. 25. Pp. 1057–1068.
100. Teo J. C. Y., Fu L., Kane C. L. Surface states and topological invariants in three-dimensional topological insulators: Application to $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ // *Phys. Rev. B.* 2008. Vol. 78. P. 045426.
101. Волков В. А. Размерное квантование и поверхностные состояния в полупроводниках с узкой запрещённой зоной: Кандидатская диссертация / Институт радиотехники и электроники АН СССР. 1976.
102. Luttinger J. M., Kohn W. Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields // *Phys. Rev.* 1955. Vol. 97, no. 4. Pp. 869–883.
103. Abramowitz M., Stegun I. A. Handbook of Mathematical Function with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables // National Bureau of Standards, Applied Mathematics Series. 1970. Vol. 55.
104. Zhang Y., Ran Y., Vishwanath A. Topological insulators in three dimensions from spontaneous symmetry breaking // *Phys. Rev. B.* 2009. Vol. 79, no. 24.
105. Sandomirskii V. Quantum Size Effect in a Semimetal Film // *Sov. Phys. JETP.* 1967. Vol. 25, no. 1. P. 101.
106. Shon N. H., Ando T. Quantum Transport in Two-Dimensional Graphite System // *Journal of the Physical Society of Japan.* 1998. Vol. 67, no. 7. Pp. 2421–2429.
107. Bernevig B. A., Hughes T. L., Zhang S.-C. Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells // *Science.* 2006. Vol. 314, no. 5806. Pp. 1757–1761.
108. Базь А. И., Зельдович Я. Б., Переломов А. М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. Наука, 1971.
109. Ландау Л. Д., Лившиц Е. М. Квантовая механика. Нерелятивистская

- теория. Том 3, §136. 6-е изд. МАИК "Наука/Интерпериодика", 2008.
110. Ju L., Geng B., Horng J. et al. Graphene plasmonics for tunable terahertz metamaterials // Nature Nanotechnology. 2011. Vol. 6, no. 10. Pp. 630–634.
111. Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции. Том 1. Наука, 1973.

Приложение А

Спектры поверхностных состояний в сильном магнитном поле

В этом приложении выводится спектр поверхностных состояний (ПС) в пределе сильных магнитных полей. Для этого мы используем интегральное представление функции Куммера $M(a, b, z)$ [111] (при $\text{Re}(b - a) > 0$):

$$M(a, b, z) = -\frac{1}{2\pi i} \frac{\Gamma(b)\Gamma(1-a)}{\Gamma(b-a)} \int_1^{(0+)} e^{zt} (-t)^{a-1} (1-t)^{b-a-1} dt, \quad (\text{A.1})$$

здесь интегрирование проходит по замкнутому контуру в плоскости комплексного параметра t с началом в точке $t = 1$ в положительном направлении вокруг точки $t = 0$. Для вычисления интеграла выберем контур, изображенный на рис.А.1.

Тогда интеграл в (А.1) можно записать в виде:

$$\int_1^{(0+)} = \int_1^\rho + \int_{C_\rho} + \int_\rho^1 = \int_{C_\rho} + (e^{i2\pi a} - 1) \int_\rho^1 \quad (\text{A.2})$$

здесь окружность C_ρ выбирается таким образом, чтобы интеграл по ней был много меньше интеграла от ρ до 1, при этом мы рассматриваем случай, когда параметр a не равен целому числу, что справедливо для ПС. Далее будет

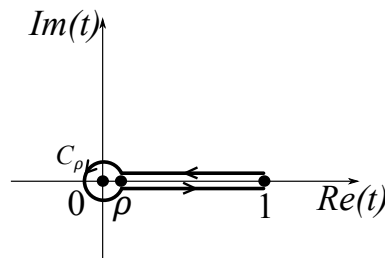


Рис. А.1. Контур интегрирования, используемый для оценки функции Куммера $M(a, b, z)$ в (А.1)

показано, что это условие удовлетворяется в пределе $z \gg b, z \gg a$. Для параметров функции Куммера $M(a, b, z)$ из дисперсионного уравнения 1.38, описывающего спектр состояний в нанопроволоке в магнитном поле при $j \leq -1/2$ этот предел есть:

$$\begin{cases} \frac{\Phi}{\Phi_0} \gg |j - 1/2| \\ \frac{\Phi}{\Phi_0} \gg \lambda^2(E^2 - m^2 - k_z^2)/2 \\ |j - 1/2| > \lambda^2(E^2 - m^2 - k_z^2)/2 \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

Теперь вычислим второй интеграл в (A.2), используя метод Лапласа. Преобразуем подынтегральное выражение к следующему виду:

$$\int_{\rho}^1 e^{zt} t^{a-1} (1-t)^{b-a-1} dt = \int_{\rho}^1 e^{zt+(a-1)\ln t+(b-a-1)\ln(1-t)} dt \equiv \int_{\rho}^1 e^{g(a,b,z;t)} dt, \quad (\text{A.4})$$

где последнее равенство суть определения функции $g(a, b, z; t)$. В рассматриваемом пределе (A.3) функция $g(a, b, z; t)$ имеет резкий максимум при $t = t_0$ в интервале $(\rho, 1)$:

$$t_0 = \frac{z - b + 2}{z} - \frac{1 - a}{z - b + 2}. \quad (\text{A.5})$$

Поэтому интеграл в (A.4) можно оценить следующим образом:

$$\begin{aligned} \int_{\rho}^1 e^{g(a,b,z;t)} dt &\approx \sqrt{\frac{2\pi}{|g''(a,b,z;t_0)|}} e^{g(a,b,z;t_0)} = \sqrt{\frac{2\pi(b-2)}{z^2}} \exp\left(z - b + 2 - \frac{z(1-a)}{z-b+2}\right) \times \\ &\times \left(\frac{z-b+2}{z} - \frac{(1-a)}{z-b+2}\right)^{a-1} \left(1 - \frac{z-b+2}{z} + \frac{1-a}{z-b+2}\right)^{b-a-1} \quad (\text{A.6}) \end{aligned}$$

Выражение (A.6) будет оценкой всей функции $M(a, b, z)$, только если радиус окружности ρ удовлетворяет условию:

$$\int_{C_{\rho}} e^{g(a,b,z;t)} \approx e^{\rho z} \rho^{a-1} \ll 2(1 - \cos(2\pi a)) \int_{\rho}^1 e^{g(a,b,z;t)} \approx e^{z-b+2} \sqrt{\frac{2\pi(b-2)}{z^2}}. \quad (\text{A.7})$$

Ясно, что в рассматриваемом пределе всегда найдется такое значение ρ , чтобы удовлетворить условию (A.7). После подстановки (A.6) в дисперсионное

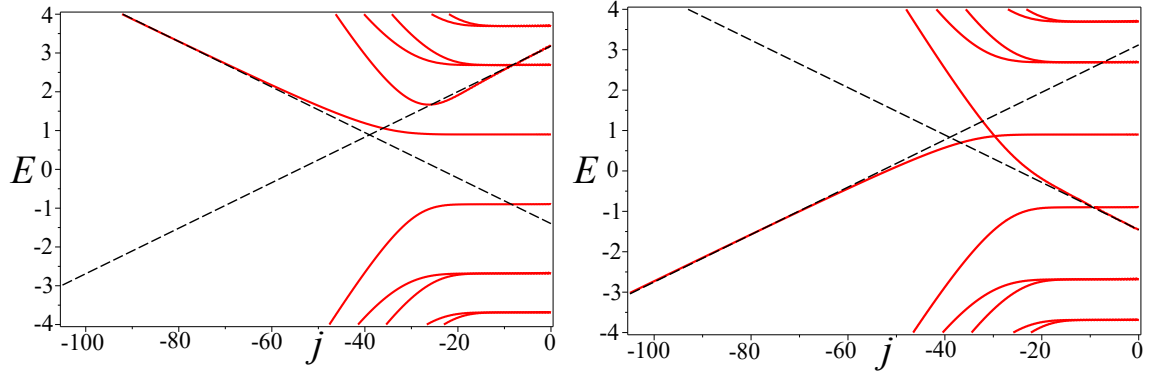


Рис. А.2. Спектр доньев подзон $E_j(k_z = 0)$ в дираковской нанопроволоке в магнитном поле, задаваемый дисперсионным уравнением (1.38) при $R = 50\text{нм}$, $\Phi = 40$, $v = 1.6 \cdot 10^6\text{м/с}$, $m = 0.1\text{эВ}$ и (a) $a_0 = -0.15$, (b) $a_0 = 0.15$. Пунктирные асимптоты спектров ПС задаются выражением (А.8).

уравнение (1.38), удерживая ведущий члены, мы получаем спектр поверхностных подзон в пределе сильных магнитных полей (А.3) (см. пунктирные прямые на рис. А.2):

$$E_{k_z j_s} = sv\hbar \sqrt{k_z^2 + \frac{(j + \Phi - 1/2)^2}{R^2}} + E_0, \quad (\text{А.8})$$

где мы сохранили все обозначения, введенные в главе 1

Приложение Б

Плотность поверхностных состояний в дираковской нанопроволоке в магнитном поле

В этом приложении выводится формула, описывающая осциллирующую зависимость плотности поверхностных состояний от магнитного потока, проходящего через сечение нанопроволоки. В квазиклассическом пределе $|\kappa R/j| \gg \max(|j|, |\Phi|)$ и в пределе сильных магнитных полей (А.3) спектр ПС записывается в виде:

$$E_{k_z j s} = s v \hbar \sqrt{k_z^2 + \frac{(j + \Phi - \gamma_B)^2}{R^2}} + E_0, \quad (\text{Б.1})$$

где $\gamma_B = 0$ в квазиклассическом пределе и $\gamma_B = 1/2$ в пределе сильных магнитных полей. Тогда для плотности ПС в нанопроволоке длины L_z можно получить следующее выражение:

$$\begin{aligned} D(E) &= \sum_{(k_z, j) \in G} \delta(E - E_{k_z, j}) = \\ &= \int \frac{L_z dk_z}{2\pi} \int dx \sum_j \delta\left(x - \frac{j}{R}\right) \delta\left(E - s \hbar v \sqrt{k_z^2 + \left(x + \frac{(\Phi - \gamma_B)}{R}\right)^2} - E_0\right) = \\ &= \frac{L_z R}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int dx \int dk_z e^{i2\pi R n x - i\pi n} \delta\left(E - s \hbar v \sqrt{k_z^2 + \left(x + \frac{(\Phi - \gamma_B)}{R}\right)^2} - E_0\right) = \\ &= \frac{L_z R}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} d\theta \int k dk e^{i2\pi R n k \sin \theta - i2\pi \Phi n + i2\pi \gamma_B n - i\pi n} \delta(E - \hbar v k - E_0) = \\ &= \Theta \left[(E - E_0) \operatorname{sgn}(a_0(a_0^2 - 1)) + \hbar v k_e \right] \frac{L_z R (E - E_0)}{2\pi (\hbar v)^2} 2\pi \left(1 + \right. \\ &\quad \left. + 2 \sum_{n=1}^{+\infty} J_0 \left(\frac{2\pi R (E - E_0) n}{\hbar v} \right) \cos(2\pi \Phi n - 2\pi \gamma_B n + \pi n) \right) \approx \\ &= \Theta \left[(E - E_0) \operatorname{sgn}(a_0(a_0^2 - 1)) + \hbar v k_e \right] \frac{L_z R (E - E_0)}{2\pi (\hbar v)^2} 2\pi \left(1 + \right. \\ &\quad \left. + 2 \sqrt{\frac{\hbar v}{\pi^2 R (E - E_0)}} \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{\cos\left(\frac{2\pi R (E - E_0) n}{\hbar v}\right)}{\sqrt{n}} \cos(2\pi \Phi n - 2\pi \gamma_B n + \pi n) \right), \end{aligned}$$

где область интегрирования задается так: $G = \{s\sqrt{k_z^2 + (j + \Phi - \gamma_B)^2/R^2} > k_e\}$, $k_e = 2|a_0|m/c\hbar|1 - a_0^2|$, $J_0(x)$ -функция Бесселя 1-го рода. В последнем равенстве мы использовали разложение $J_0(x)$ в пределе $x \gg 1$.