

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

«Косвенное обменное взаимодействие магнитных  
примесей, расположенных вблизи края двумерного  
ТОПОЛОГИЧЕСКОГО ИЗОЛЯТОРА»  
(выпускная квалификационная работа)

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

Черноголовка 2016

# Оглавление

<b>1 Введение</b>	<b>2</b>
1.1 Постановка задачи . . . . .	4
1.2 План работы . . . . .	4
1.3 2D топологический изолятор на основе квантовой ямы CdTe/HgTe/CdTe	5
1.4 Краевые состояния в 2D топологическом изоляторе . . . . .	7
1.4.1 Используемые обозначения . . . . .	7
1.4.2 Краевые состояния . . . . .	8
1.5 Магнитная примесь в 2D топологическом изоляторе на основе квантовой ямы CdTe/HgTe/CdTe . . . . .	11
<b>2 Модель двумерного топологического изолятора</b>	<b>13</b>
2.1 Собственные состояния . . . . .	14
2.1.1 Краевые состояния . . . . .	14
2.1.2 Объемные состояния в присутствии края . . . . .	15
2.2 Функция Грина . . . . .	16
2.2.1 Функция Грина краевых состояний . . . . .	17
2.2.2 Функция Грина объемных состояний . . . . .	17
<b>3 Косвенное обменное взаимодействие на краю двумерного топологического изолятора</b>	<b>18</b>
3.1 РККИ взаимодействие на языке диаграммной техники . . . . .	18
3.2 РККИ за счет краевых состояний . . . . .	20
3.3 РККИ за счет объемных состояний . . . . .	21
3.4 РККИ за счет интерференции краевых и объемных состояний . . . . .	24
3.4.1 Функция Грина объемных состояний . . . . .	24
3.4.2 Поляризационный оператор интерференционного РККИ . . . . .	27
3.5 Анализ ответа для интерференционного РККИ . . . . .	29
<b>4 Заключение</b>	<b>32</b>
<b>5 Приложения</b>	<b>33</b>
5.1 Приложение А . . . . .	33
5.2 Приложение В . . . . .	34
5.3 Приложение С . . . . .	35

# Глава 1

## Введение

В последнее время широкое внимание приковано к особому классу материалов, называемых топологическими изоляторами [1]. Имеется множество различных примеров таких веществ (или гетероструктур). К 3D топологическим изоляторам относятся, например,  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ ,  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  и  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$ . Самым известным примером двумерного топологического изолятора является квантовая яма  $\text{CdTe}/\text{HgTe}/\text{CdTe}$  с шириной  $d > d_c \simeq 6.3\text{nm}$ . Эти материалы являются изоляторами с точки зрения проводимости в объеме, однако, имеют набор бесщелевых металлических состояний, локализованных на границе образца. Эти состояния обладают особенностью - в них спин связан с направлением движения. Это приводит к тому, что в отсутствии электрон-электронного взаимодействия, они устойчивы к любому возмущению, которое не нарушает симметрию по отношению к обращению времени.

В данной работе речь пойдет о 2D топологическом изоляторе. В работах [2],[3] теоретически был предсказан квантовый спиновых эффект Холла в  $\text{CdTe}/\text{HgTe}/\text{CdTe}$  с идеальной проводимостью краевых состояний. Этот результат подтвердился в экспериментальной работе [4]. Как упоминалось выше, наличие потенциальных примесей в системе без электрон-электронного взаимодействия нарушить этого результата не может. Ситуация обстоит иначе, когда примеси магнитны (один из самых широко известных примеров - это атомы Mn со спином 5/2). Дело в том, что классические магнитные примеси нарушают симметрию по отношению к обращению времени. Их наличие, с одной стороны, может не разрушить краевых состояний как таковых, а с другой стороны, может оказывать существенное влияние на транспорт вдоль края (см. [5], [6], [7]). Это одна из причин, по которым возникает интерес к исследованию магнитных примесей в 2D топологических изоляторах.

Другой важный вопрос - в какой магнитной фазе (ферромагнетик, антиферромагнетик, спиновое стекло и т.д.) находится система из примесей, помещенная в 2D топологический изолятор? Для того, чтобы ответить на него, необходимо изучить спиновую структуру и пространственную зависимость взаимодействия между примесями. Если их концентрация достаточно мала, прямого обмена между ними не происходит. Однако, имеет место косвенное обменное взаимодействие, также известное как взаимодействие Рудермана-Киттеля-Касуи-Иосиды (РККИ).

Впервые такой тип взаимодействия был рассмотрен в работах [8], [9] и [10]. В них речь идет о косвенном обмене между магнитными ионами в металлах. Качественно имеет место следующая картина взаимодействия: магнитная примесь, помещенная в Ферми-газ из электронов, вызывает в нем спиновую поляризацию, которая осциллиру-

ет и спадает по мере удаления от примеси. Более точно, в трехмерном случае она ведет себя следующим образом

$$\mathbf{P}_{\text{spin}} \sim \frac{2k_F r \cos 2k_F r - \sin 2k_F r}{r^4} \mathbf{S} \quad (1.1)$$

Здесь под  $\mathbf{P}_{\text{spin}}$  подразумевается средняя поляризация единицы объема,  $r$  - расстояние до примеси,  $\mathbf{S}$  - ее спин, а  $k_F$  - фермиевский волновой вектор электронов.

Вторая примесь, помещенная в Ферми-газ взаимодействует с описанной выше поляризацией. Таким образом, между примесями возникает эффективное взаимодействие Гейзенберговского типа, связанное с косвенным обменом через электроны проводимости, описывающееся следующим Гамильтонианом  $H_{\text{exchange}} \sim (\mathbf{S}^A \cdot \mathbf{S}^B)$  (этот простейший вид реализуется, если обмен между примесью и отдельными электронами изотропен). Здесь  $\mathbf{S}^A$  и  $\mathbf{S}^B$  - спины первой и второй примеси соответственно. В более сложных случаях, спиновая структура может быть устроена менее тривиально. Например, если присутствует спин-орбитальное взаимодействие, то в РКИ может возникнуть слагаемое Дзялошинского-Мории  $H_{\text{DM}} \sim [\mathbf{S}^A \times \mathbf{S}^B]_n$ , где  $n$  - некоторое направление, которое определяется симметрией кристалла.

Однако, в нашем случае, речь идет не о металле, а о полупроводниковой гетероструктуре, то есть материале с щелью в спектре. Вопрос о косвенном обменном взаимодействии в таких веществах впервые поднимается в работе Бломбергена и Роуланда [11]: они рассматривают косвенный обмен между ядерными спинами в таллии, то есть в изоляторе. Они показали, что в том случае, когда химический потенциал лежит в щели, имеется ненулевое косвенное обменное взаимодействие даже при нулевой температуре, связанное с виртуальными перебросами электронов через щель в спектре. Особенностью РКИ взаимодействия в этом случае является его экспоненциальное убывание с расстоянием. Вопрос о косвенном обменном взаимодействии в полупроводниках был рассмотрен Абрикосовым (см. [12]). В частности, он показал, что в случае несовпадения дна зоны проводимости и потолка валентной зоны в  $k$ -пространстве, помимо экспоненциального затухания, в обменном взаимодействии имеют место осцилляции.

РКИ взаимодействие в толще двумерного топологического изолятора на основе квантовой ямы CdTe/HgTe/CdTe подробно рассматривается в дипломной работе [13]. В ней обсуждается спиновая и пространственная структура такого взаимодействия для ямы, не обладающей интерфейсной симметрией.

В простейшем случае, когда этой асимметрией можно пренебречь РКИ взаимодействие содержит четыре группы слагаемых: изинговское  $zz$  взаимодействие, где  $z$  - направление, перпендикулярное квантовой яме, изотропное взаимодействие  $xx$  и  $yy$  в плоскости ямы, анизотропное взаимодействие в плоскости, а также слагаемое Дзялошинского-Мории. При этом, сила взаимодействия, как и следовало ожидать, спадает экспоненциально с увеличением расстояния между примесями.

Наличие асимметрии интерфейсов приводит к возникновению новых слагаемых в РКИ взаимодействии, не обладающих вращательной инвариантностью, а кроме того, к возникновению осцилляций в пространственной зависимости.

Другой вопрос - это устройство РКИ взаимодействия магнитных примесей, расположенных вблизи края 2D топологического изолятора. Ясно, что наличие металлических краевых состояний может привести к ответу, который более не спадает экспоненциально по мере разнесения примесей вдоль края и осциллирует с удвоенным фермиевским волновым вектором. Такой вопрос обсуждается в статье [14]. Авторы рассматривают

магнитные примеси, расположенные в точности на краю и решают задачу в модели одномерных фермионов с линейным спектром, которые описываются в простейшем случае Гамильтонианом:

$$H = \int dy \Psi^\dagger(y) i\partial_y \sigma_z \Psi(y), \quad (1.2)$$

где  $\Psi(y)$  - оператор уничтожения электрона на краю. Матрица взаимодействия с примесью, при этом, имеет вид

$$V_{imp} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \begin{pmatrix} J_z S_z & J_\perp S_- \\ J_\perp S_+ & -J_z S_z \end{pmatrix} \quad (1.3)$$

где  $\mathbf{r}_0$  - положение примеси.

Результат для косвенного обменного взаимодействия в такой постановке

$$H_{\text{exchange}} = \frac{J_\perp^A J_\perp^B}{2\pi v_F |y_A - y_B|} (\sin 2\mu(y_A - y_B) [\mathbf{S}^A \times \mathbf{S}^B]_z - \cos 2\mu(y_A - y_B) (\mathbf{S}_\parallel^A \cdot \mathbf{S}_\parallel^B)) \quad (1.4)$$

Здесь индекс  $z$  обозначает направление, перпендикулярное квантовой яме. Видно, что получился ответ, спадающий степенным образом с увеличением расстояния между магнитными примесями. Помимо этого, такой вид взаимодействия на содержит  $z$ -компонент спинов примесей.

Кроме того, в этой же работе обсуждаются эффекты спин-орбитального взаимодействия Рашбы и взаимодействия между электронами.

## 1.1 Постановка задачи

Итак, ранее рассматривались две задачи - взаимодействие магнитных примесей глубоко в толще 2D топологического изолятора и взаимодействие магнитных примесей, расположенных строго на краю. В связи с этим встает несколько вопросов, на которые данные предельные случаи ответа не дают:

- Как устроено косвенное обменное взаимодействие в случае, когда одна из примесей находится вблизи края, а другая - в толще?
- В обоих перечисленных выше случаях за РКИ взаимодействие отвечает что-то одно: либо только объемные, либо только краевые состояния. Возможно ли наличие во взаимодействии интерференционных слагаемых, за которые одновременно отвечают и состояния в толще, и состояния на краю?
- Как видоизменяется РКИ взаимодействие, связанное с объемными состояниями, вблизи края?

Данная дипломная работа посвящена поиску ответа на эти вопросы.

## 1.2 План работы

Работа выстроена следующим образом. Во введении производиться краткий обзор того, как описывается 2D топологический изолятор на основе квантовой ямы CdTe/HgTe/CdTe. В Главе 2 рассматривается модель, в который впоследствии будут вестись вычисления косвенного обменного взаимодействия примесей, расположенных недалеко от края. В Главе 3 непосредственно описывается структура взаимодействия. В Главе 4 подводятся итоги исследования. В Главе 5 приведены приложения к работе.

### 1.3 2D топологический изолятор на основе квантовой ямы CdTe/HgTe/CdTe

Прежде чем переходить к линеаризованной упрощенной модели, в которой будет вестись описание РККИ взаимодействия в данной работе, необходимо кратко рассмотреть несколько вопросов, связанных с квантовой ямой CdTe/HgTe/CdTe и топологической фазой в ней - это послужит обоснованием используемого Гамильтониана электронов и примеси.

Экспериментально такие квантовые ямы представляют собой большое количество последовательных слоев вида  $\text{Cd}_{1-x}\text{Hg}_x\text{Te}$  (см. рис. 1.1). Однако, теоретически обычно рассматривается упрощенная схема из трех слоев, а именно CdTe/HgTe/CdTe (см. [3]). Обсудим, как она устроена. Но прежде чем описывать непосредственно гетероструктуру CdTe/HgTe/CdTe (выращенную в направлении [001] - параллельно ему мы направляем  $z$ ), стоит кратко рассмотреть способ описания электронов в кристаллах с симметрией тетраэдра  $T_d$ , так же известной как симметрия цинковой обманки. И CdTe, и HgTe обладают именно этой структурой. В двойной, то есть учитывающей неэквивалентность вращения на  $2\pi$  и тождественного элемента из-за наличия спина, группе есть всего три неприводимых представления: два двумерных -  $\Gamma_6$  и  $\Gamma_7$ , и одно четырехмерное  $\Gamma_8$  (см. [16]). Базисные функции этих представлений можно записать в виде  $|s \downarrow\rangle$  и  $|s \uparrow\rangle$  для  $\Gamma_6$ ,  $|\frac{1}{\sqrt{3}}[(-(\tilde{x} - iy)\uparrow + \tilde{z}\downarrow]\rangle$  и  $|\frac{1}{\sqrt{3}}[(-(\tilde{x} + iy)\downarrow - \tilde{z}\uparrow]\rangle$  для  $\Gamma_7$ , и, в конце концов,  $|\frac{1}{\sqrt{2}}(x - iy)\downarrow\rangle$ ,  $|\frac{1}{\sqrt{6}}[(x - iy)\uparrow + 2z\downarrow]\rangle$ ,  $|\frac{1}{\sqrt{6}}[-(x + iy)\downarrow + 2z\uparrow]\rangle$  и  $|\frac{1}{\sqrt{2}}(x + iy)\uparrow\rangle$  для  $\Gamma_8$ . Символ  $|s\rangle$  значит, что это состояние не преобразуется под действием операций из  $T_d$ , символы  $|x\rangle$ ,  $|y\rangle$  и  $|z\rangle$  означают, что эти состояния преобразуются, как соответствующие компоненты радиус-вектора.

Стандартный подход к описанию HgTe и CdTe - точно учесть две ветви  $\Gamma_6$  и  $\Gamma_8$ , а все остальные ветви - по  $k \cdot r$  теории возмущений. Для начала заметим, что состояния из этих ветвей можно записать так:

$$\Gamma_6 : \begin{cases} |1/2, +1/2\rangle = |s \uparrow\rangle \\ |1/2, -1/2\rangle = |s \downarrow\rangle \end{cases} \quad (1.5)$$

$$\Gamma_8 : \begin{cases} |3/2, +3/2\rangle = |\frac{-1}{\sqrt{2}}(x + iy)\uparrow\rangle \\ |3/2, +1/2\rangle = |\frac{1}{\sqrt{6}}[-(x + iy)\downarrow + 2z\uparrow]\rangle \\ |3/2, -1/2\rangle = |\frac{1}{\sqrt{6}}[(x - iy)\uparrow + 2z\downarrow]\rangle \\ |3/2, -3/2\rangle = |\frac{1}{\sqrt{2}}(x - iy)\downarrow\rangle \end{cases} \quad (1.6)$$

то есть классифицировать состояния по их угловому моменту и его проекции в том смысле, что они преобразуются как состояния с заданным моментом при вращениях из

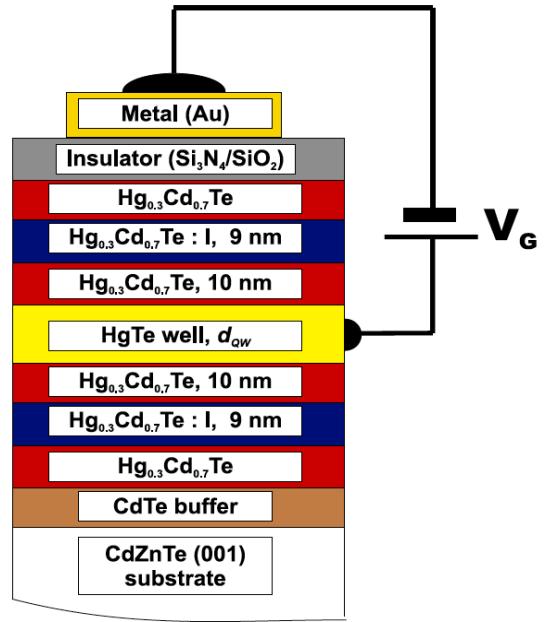


Рис. 1.1: Схема экспериментальной установки, заимствована из [15]

для  $\Gamma_7$ , и, в конце концов,  $|\frac{1}{\sqrt{2}}(x - iy)\downarrow\rangle$ ,  $|\frac{1}{\sqrt{6}}[(x - iy)\uparrow + 2z\downarrow]\rangle$ ,  $|\frac{1}{\sqrt{6}}[-(x + iy)\downarrow + 2z\uparrow]\rangle$  и  $|\frac{1}{\sqrt{2}}(x + iy)\uparrow\rangle$  для  $\Gamma_8$ . Символ  $|s\rangle$  значит, что это состояние не преобразуется под действием операций из  $T_d$ , символы  $|x\rangle$ ,  $|y\rangle$  и  $|z\rangle$  означают, что эти состояния преобразуются, как соответствующие компоненты радиус-вектора.

Стандартный подход к описанию HgTe и CdTe - точно учесть две ветви  $\Gamma_6$  и  $\Gamma_8$ , а все

остальные ветви - по  $k \cdot r$  теории возмущений. Для начала заметим, что состояния из этих ветвей можно записать так:

$$\Gamma_6 : \begin{cases} |1/2, +1/2\rangle = |s \uparrow\rangle \\ |1/2, -1/2\rangle = |s \downarrow\rangle \end{cases} \quad (1.5)$$

$$\Gamma_8 : \begin{cases} |3/2, +3/2\rangle = |\frac{-1}{\sqrt{2}}(x + iy)\uparrow\rangle \\ |3/2, +1/2\rangle = |\frac{1}{\sqrt{6}}[-(x + iy)\downarrow + 2z\uparrow]\rangle \\ |3/2, -1/2\rangle = |\frac{1}{\sqrt{6}}[(x - iy)\uparrow + 2z\downarrow]\rangle \\ |3/2, -3/2\rangle = |\frac{1}{\sqrt{2}}(x - iy)\downarrow\rangle \end{cases} \quad (1.6)$$

то есть классифицировать состояния по их угловому моменту и его проекции в том смысле, что они преобразуются как состояния с заданным моментом при вращениях из

группы  $T_d$  (представления  $\Gamma_6$  и  $\Gamma_8$  являются сужением с двумерного  $D_{1/2}$  и четырехмерного  $D_{3/2}$  представления полной группы вращений на  $T_d$  соответственно).

В простейшем случае (пренебрегая ветвями  $\Gamma_7$  в теории возмущений - применимость такого приближения есть отдельный вопрос, однако, он абсолютно не существен для последующих выкладок) эффективный Гамильтониан  $6 \times 6$ , который описывает эти ветви, в базисе, записанном выше, имеет вид (подробный вывод см. в [13])

$$H_{Kane}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \left(E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}\right) \mathcal{I}_{2 \times 2} & T(\mathbf{k}) \\ T^\dagger(\mathbf{k}) & H_v^{4 \times 4}(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad T(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \frac{-1}{\sqrt{2}} Pk^+ & \sqrt{\frac{2}{3}} Pk_z & \frac{1}{\sqrt{6}} Pk^- & 0 \\ 0 & \frac{-1}{\sqrt{6}} Pk^+ & \sqrt{\frac{2}{3}} Pk_z & \frac{1}{\sqrt{2}} Pk^- \end{pmatrix}$$

$$H_v^{4 \times 4}(\mathbf{k}) = \left(E_v - \frac{\hbar^2}{2m} (\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma_2) k^2\right) \mathcal{I}_{4 \times 4} + \frac{\hbar^2}{m} \gamma_2 (\mathbf{k} \cdot \mathbf{J}_{3/2})^2 \quad (1.7)$$

Этот выражение называется Гамильтонианом Кейна. В нем  $P$  - матричный элемент Кейна (см. [17]),  $m^*$  - эффективная масса зоны проводимости. В Гамильтониане валентной зоны  $H_v^{4 \times 4}(\mathbf{k})$   $\gamma_i$  - безразмерные величины, называющиеся параметрами Латтингера,  $m$  - масса электрона,  $\mathcal{I}_{n \times n}$  - единичная матрица размера  $n$ , а  $\mathbf{J}_{3/2}$  - вектор из матриц момента  $3/2$ .

Если теперь рассмотреть гетероструктуру CdTe/HgTe/CdTe [001], разбить ее на три области - каждая соответствует одному из слоев, учесть, что  $k_z = -i\partial_z$ , и решить полученное уравнение Шрёдингера при  $\mathbf{k}_{||} = 0$ , то получится набор размерно-квантованных решений  $|E_1 \pm\rangle, |H_1 \pm\rangle, |L_1 \pm\rangle, |E_2 \pm\rangle, |H_2 \pm\rangle, \dots$

Рассмотрим низкоэнергетические состояния. Для них:

$$|E_1+\rangle : f_1^1(z)|1/2, +1/2\rangle + f_4^1(z)|3/2, +1/2\rangle; |E_1-\rangle : f_2^1(z)|1/2, -1/2\rangle + f_5^1(z)|3/2, -1/2\rangle$$

$$|H_1+\rangle : f_3^1(z)|3/2, +3/2\rangle; |H_1-\rangle : f_6^1(z)|3/2, -3/2\rangle$$

Здесь  $f_i^1$  - огибающие функции, при этом  $f_1^1$  симметрична относительно  $z \rightarrow -z$ , в то время как  $f_4^1$  антисимметрична; аналогично для  $f_2^1$  и  $f_5^1$  соответственно.  $f_3^1$  и  $f_6^1$  симметричны (см. [17]).

При этом стоит иметь в виду, что контакт HgTe и CdTe инвертированный, в том смысле, что в CdTe  $\Gamma_8$  лежит ниже  $\Gamma_6$ , а в HgTe наоборот.

Низкоэнергетический Гамильтониан в базисе  $(|E_1, +\rangle, |H_1, +\rangle, |E_1, -\rangle, |H_1, -\rangle)$  получается проектированием Гамильтонана Кейна на эти состояния при конечном  $\mathbf{k}_{||}$

$$H_{ij}^{eff} = \langle i | H_{Kane}(\mathbf{k}_{||}, -i\partial_z) | j \rangle \quad (1.8)$$

Полученный Гамильтонан называется Гамильтонаном Берневига-Хьюза-Жанга или Гамильтонианом BHZ (см. [3]). Он имеет вид (здесь и далее под  $k$  понимается волновой вектор в плоскости)

$$H_{BHZ} = \epsilon_k I + \begin{pmatrix} M(k) & Ak_+ & 0 & 0 \\ Ak_- & -M(k) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M(k) & -Ak_- \\ 0 & 0 & -Ak_+ & -M(k) \end{pmatrix} \quad (1.9)$$

Здесь

$$\epsilon_k = C - D(k_x^2 + k_y^2) \quad M(k) = M - B(k_x^2 + k_y^2) \quad k_+ = k_x + ik_y \quad k_- = k_+^*,$$

где  $A, B, C, D, M$  - некоторые постоянные величины.

Далее делаем сдвиг по энергии так, чтобы  $C = 0$ .

Параметры этого Гамильтониана приведены в таблице 1.1 для двух реалистичных значений толщины квантовой ямы

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

Таблица 1.1: Параметры Гамильтониана BHZ, данные из [1]

Ветви этого спектра

$$E_{\pm} = -Dk^2 \pm \sqrt{A^2 k^2 + (M - Bk^2)^2}, \quad (1.10)$$

каждая ветвь двукратно выражена.

Вид этого спектра приведен на рисунке 1.2

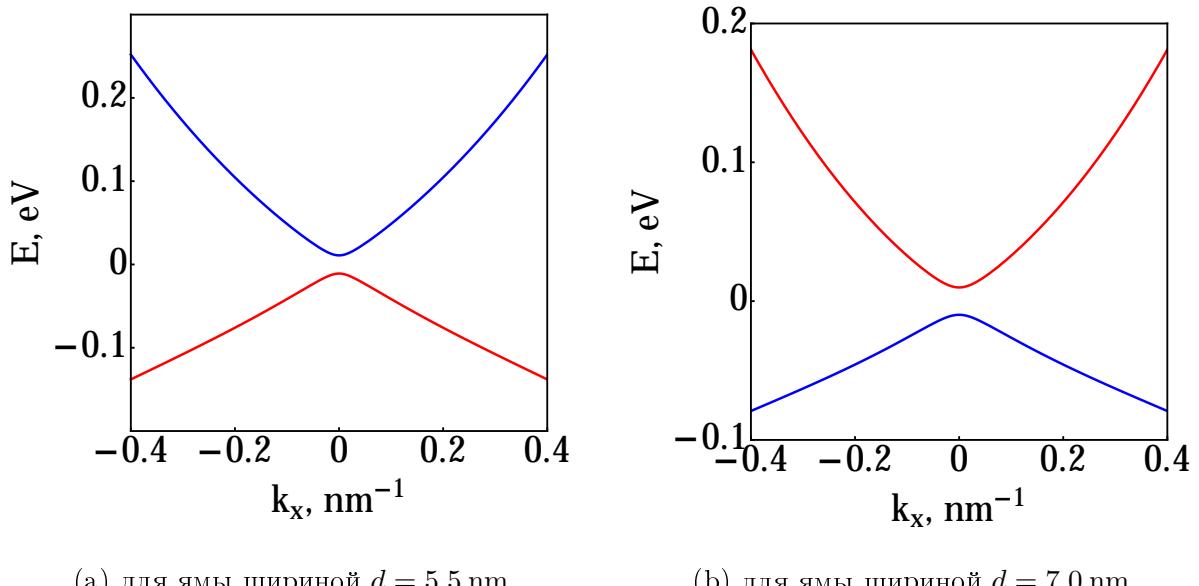


Рис. 1.2: Спектр электронов в квантовой яме CdTe/HgTe/CdTe

Теперь можно перейти к следующему этапу: увидеть как и при каких условиях из этого Гамильтониана возникают краевые состояния.

## 1.4 Краевые состояния в 2D топологическом изоляторе

### 1.4.1 Используемые обозначения

Прежде, чем говорить о краевых состояниях, введем удобные обозначения, которые будут использованы в дальнейшем.

Обозначим

$$\cosh \chi = -\frac{B}{\sqrt{B^2 - D^2}}, \quad \sinh \chi = \frac{D}{\sqrt{B^2 - D^2}}$$

Здесь мы используем тот факт, что типично  $B < 0$  и  $|B| > |D|$ . Эти неравенства выполнены для реалистичных параметров Гамильтониана BHZ (см. таблицу 1.1).

$$a = \frac{\sqrt{B^2 - D^2}}{A}, \quad \Xi = \frac{A^2}{\sqrt{B^2 - D^2}}, \quad m = M/\Xi$$

Параметр  $a$  имеет размерность длины, в нем будет удобно измерять расстояния.  $\Xi$  будем брать за единицу энергии. С такой точки зрения  $m$  имеет смысл безразмерной щели. Введем, кроме того, безразмерный волновой вектор и расстояние:

$$k \frac{a}{|m|} \rightarrow k, \quad r \frac{|m|}{a} \rightarrow r$$

Приведенные параметры Гамильтониана BHZ приведены в следующей таблице:

$d$ , nm	$a$ , nm	$\chi$	$\Xi$ , eV	$m$
5.5	0.94	-0.77	0.42	0.022
7.0	1.29	-0.95	0.28	-0.029

Таблица 1.2: Приведенные параметры Гамильтониана BHZ

В безразмерных единицах спектр имеет вид:

$$\varepsilon_{\pm}(\mathbf{k}) = -|m| \sinh \chi k^2 \pm \sqrt{(1 + m \cosh \chi k^2)^2 + k^2} \quad (1.11)$$

### 1.4.2 Краевые состояния

Рассмотрим теперь процесс вывода краевых состояний из Гамильтониана BHZ.

Допустим, что квантовая яма занимает полупространство  $x < 0$ . Тогда  $k_x$  не является хорошим квантовым числом и его нужно заменить дифференцированием  $-i\partial_x$ . Будем искать решения, которые удовлетворяют открытым граничным условиям, то есть  $\psi|_{x=0} = 0$ .

Здесь стоит упомянуть важное обстоятельство. Рассматривая систему обладает Т - инвариантностью. Поэтому на каждое решение уравнения Шрёдингера приходится еще одно решение, получающееся из первого обращением времени. Отражение этого обстоятельства в Гамильтониане (1.9) - его блочная форма. Блоки связаны комплексным сопряжением и заменой  $k \rightarrow -k$ :

$$H_{BHZ} = \begin{pmatrix} H(k) & \hat{0} \\ \hat{0} & H^*(-k) \end{pmatrix}$$

Как видно, верхний и нижний блоки независимы, так что начнем с рассмотрения решения вида  $(\psi_1, \psi_2, 0, 0)^T$ . При фиксированном  $k_y$  в безразмеренных единицах, описанных выше, уравнение Шрёдингера приводит к следующей системе:

$$\begin{cases} \psi_1'' = \left( \frac{\text{sign } m - \varepsilon}{|m|} e^\chi + k_y^2 \right) \psi_1 - i \frac{e^\chi}{|m|} \psi_2' + ik_y \frac{e^\chi}{|m|} \psi_2 \\ \psi_2'' = \left( \frac{\text{sign } m + \varepsilon}{|m|} e^{-\chi} + k_y^2 \right) \psi_2 + i \frac{e^{-\chi}}{|m|} \psi_1' + ik_y \frac{e^{-\chi}}{|m|} \psi_1 \end{cases} \quad (1.12)$$

Здесь  $\varepsilon$  - энергия. Ее собственные значения  $\pm \lambda_1$  и  $\pm \lambda_2$ , где:

$$\lambda_1(\varepsilon, k_y) = \frac{1}{\sqrt{2|m|}} \sqrt{2m^2 k_y^2 + E_1 + E_2 + 1 + \sqrt{(E_1 + E_2 + 1)^2 - 4E_1 E_2}} \quad (1.13)$$

$$\lambda_2(\varepsilon, k_y) = \frac{1}{\sqrt{2|m|}} \sqrt{2m^2 k_y^2 + E_1 + E_2 + 1 - \sqrt{(E_1 + E_2 + 1)^2 - 4E_1 E_2}}, \quad (1.14)$$

а  $E_1 = |m|(\text{sign } m - \varepsilon)e^\chi$  и  $E_2 = |m|(\text{sign } m + \varepsilon)e^{-\chi}$ .

Будем описывать краевые состояния по теории возмущений, начав с  $k_y = 0$ .

Определим  $X(\varepsilon) = E_1 + E_2 + 1$  и  $Y(\varepsilon) = 4E_1E_2$ . Выберем некоторый  $\varepsilon$ . Тогда в случае  $Y(\varepsilon) > X^2(\varepsilon)$  или  $\begin{cases} Y(\varepsilon) < X^2(\varepsilon) \\ Y(\varepsilon) > 0 \\ X(\varepsilon) > 0 \end{cases}$  имеется действительная часть и у  $\lambda_1(\varepsilon, 0)$ , и у  $\lambda_2(\varepsilon, 0)$ .

Во втором случае собственные значения чисто вещественны.

Допустим теперь, что одно из этих условий выполнено. Тогда *может* найтись решение, волновая функция которого спадает до нуля в толще топологического изолятора (в пределе  $x \rightarrow -\infty$ ) и удовлетворяет открытым граничным условиям. Определим  $\nu(\varepsilon, 0)$  из  $\pm\lambda_1(\varepsilon, 0)$  и  $\eta(\varepsilon, 0)$  из  $\pm\lambda_2(\varepsilon, 0)$  так, что и  $\eta(\varepsilon, 0)$ , и  $\nu(\varepsilon, 0)$  имеют положительную действительную часть.

Тогда решение должно иметь вид

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} (e^{\eta x} - e^{\nu x})$$

что, после подстановки в систему (1.12), приводит к следующим условиям

$$m^2(\eta(\varepsilon, 0) + \nu(\varepsilon, 0))^2 = 1, \quad \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = C \begin{pmatrix} 1 \\ ie^{-\chi} \end{pmatrix} \quad (1.15)$$

Здесь  $C$  - нормировочная постоянная.

Решение этих уравнений приводит к

$$\varepsilon(0) = -\tanh \chi$$

Чтобы убедиться, что таким образом действительно найдено краевое состояние, необходимо проверить предположение о том, что имеются два собственных числа системы с положительной действительной частью. Для этого должно выполняться

$$\begin{cases} 0 < -m < \frac{\cosh \chi}{4} \Rightarrow \begin{cases} Y(\varepsilon(0)) < X^2(\varepsilon(0)) \\ Y(\varepsilon(0)) > 0 \\ X(\varepsilon(0)) > 0 \end{cases} \\ \frac{\cosh \chi}{4} < -m \Rightarrow Y(\varepsilon(0)) > X^2(\varepsilon(0)) \end{cases} \quad (1.16)$$

Таким образом, условие на наличие краевого состояния - нетривиальность топологической фазы, то есть  $m < 0$ . Стоит обратить внимание, что если щель достаточна велика, то волновая функция краевого состояния начинает осциллировать по мере удаления от края.

Следующее замечание состоит в том, что для параметров, приведенных в таблице 1.1 для  $d = 7.0\text{nm}$ ,  $1/\eta \simeq 60\text{nm}$ , в то время как  $1/\nu \simeq 1.5\text{nm}$ , т.е. порядка постоянной решетки  $b = 0.6\text{ nm}$ . Это вызывает некоторые вопросы - Гамильтониан BHZ *принципиально* работает только на масштабах намного больше постоянной решетки. В последствии помимо открытых граничных условий мы будем использовать подход, аналогичный использованному Волковым и Панкратовым в [18].

Рассмотрим теперь не равный нулю  $k_y$  при помощи теории возмущений.  
Возмущение в верхнем блоке BHZ имеет вид:

$$\Delta V = \begin{pmatrix} 0 & ik_y \\ -ik_y & 0 \end{pmatrix} \quad (1.17)$$

что приводит к

$$\varepsilon(k_y) = -\tanh \chi - \frac{1}{\cosh \chi} k_y$$

Стоит обратить внимание, что краевое состояние, связанное с верхним блоком, движется строго *против* оси  $y$ . Итак, состояния с положительной проекцией момента обладает отрицательной скоростью.

Аналогично рассматривается краевое состояние, связанное с нижним блоком. Его дисперсия

$$\varepsilon(k_y) = -\tanh \chi + \frac{1}{\cosh \chi} k_y$$

то есть, оно обладает положительной скоростью.

Итак, есть два краевых состояния. Первое обладает отрицательной дисперсией  $\varepsilon(k_y) = -\tanh \chi - \frac{1}{\cosh \chi} k_y$  и имеет вид

$$\Psi^\uparrow(k_y) = \frac{e^{ik_y y}}{\sqrt{2\pi}} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{1+e^{-2\chi}}} \\ \frac{i}{\sqrt{1+e^{2\chi}}} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} (e^{\eta x} - e^{\nu x}) \sqrt{\frac{2\eta\nu(\eta+\nu)}{(\eta-\nu)^2}} \quad (1.18)$$

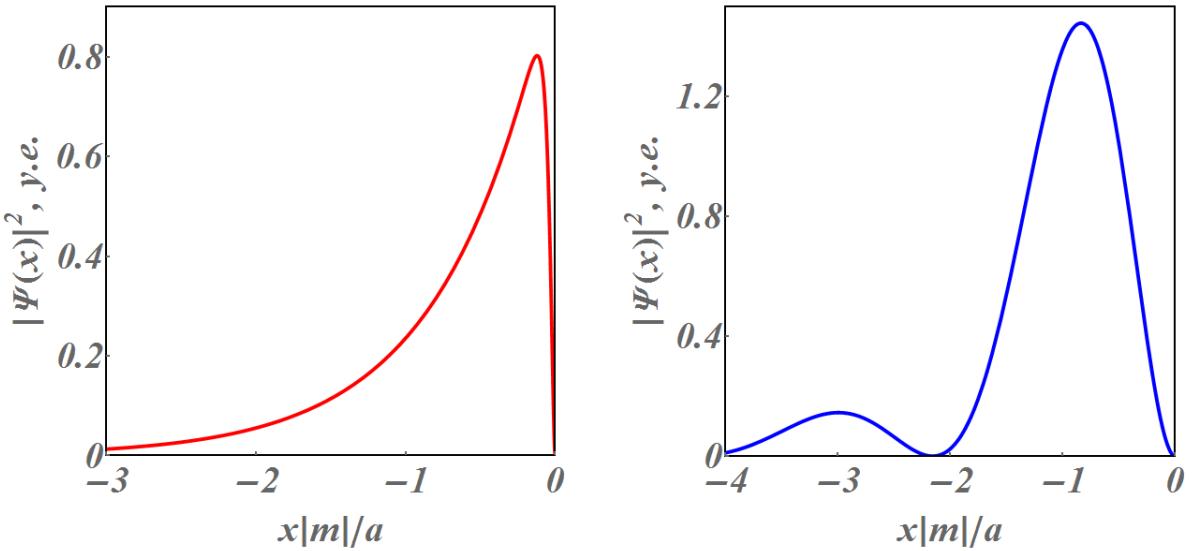
Здесь  $\nu = \nu(\varepsilon(k_y), k_y)$  и  $\eta = \eta(\varepsilon(k_y), k_y)$ .

Второе обладает положительной дисперсией  $\varepsilon(k_y) = -\tanh \chi + \frac{1}{\cosh \chi} k_y$  и имеет вид:

$$\Psi^\downarrow(k_y) = \frac{e^{ik_y y}}{\sqrt{2\pi}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{1+e^{-2\chi}}} \\ \frac{-i}{\sqrt{1+e^{2\chi}}} \end{pmatrix} (e^{\eta x} - e^{\nu x}) \sqrt{\frac{2\eta\nu(\eta+\nu)}{(\eta-\nu)^2}} \quad (1.19)$$

Такой вид нормировочных констант имеет место, пока и  $\eta$ , и  $\nu$  чисто действительны. В случае, когда они имеют мнимую часть, возникают непринципиальные усложнения.

Явный вид краевых состояний представлен на рис. 1.3. Здесь приведено два случая: для реалистичных параметров с  $d = 7.0$  nm, а также для случая с теми же параметрами за исключением щели - она увеличена в 10 раз. Во втором случае в краевом состоянии возникают осцилляции, о которых упоминалось ранее.



(a) для квантовой ямы шириной  $d = 7.0 \text{ nm}$ ,  $k_y = 0$

(b) для преувеличенной щели  $m = 0.28$ ,  $k_y = 0$

Рис. 1.3: Спектр электронов в квантовой яме CdTe/HgTe/CdTe

Стоит заметить, что такой закон дисперсии *точен* в той же степени, в которой точен BHZ, в том смысле, что решение модели BHZ приводит строго к выписанному выше ответу, не прибегая к теории возмущений.

Другое замечание состоит в том, что краевые состояния в модели BHZ определены не для любого  $k_y$ . В точках (для состояния с отрицательной дисперсией)

$$k_1 = -\frac{\tanh \chi + \sqrt{\frac{4|m|}{\cosh \chi} + \tanh^2 \chi}}{2|m|}, \quad k_2 = -\frac{\tanh \chi - \sqrt{\frac{4|m|}{\cosh \chi} + \tanh^2 \chi}}{2|m|} \quad (1.20)$$

спектр краевого состояния влиается в спектр состояний в толще. При этом, глубина проникновения в них становится бесконечной.

## 1.5 Магнитная примесь в 2D топологическом изоляторе на основе квантовой ямы CdTe/HgTe/CdTe

Следующий шаг это учет магнитной примеси в квантовой яме. Подробный анализ этой задачи приведен в работе [13]. В ней показано, что микроскопический Гамильтониан вида  $V_{imp} = J(\mathbf{r})\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\sigma}$  при учете того, что электроны с разных ветвей взаимодействуют с примесью по-разному, приводит в рамках теории возмущений к следующей поправке к Гамильтониану BHZ:

$$V_{imp}^{2D} = \mathcal{V}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \begin{pmatrix} J_1 S_z & -iJ_0 S_+ & J_{mix} S_- & 0 \\ iJ_0 S_- & J_2 S_z & 0 & 0 \\ J_{mix} S_+ & 0 & -J_1 S_z & -iJ_0 S_- \\ 0 & 0 & iJ_0 S_+ & -J_2 S_z \end{pmatrix} \quad (1.21)$$

где  $\mathbf{r}_0$  - двумерный радиус-вектор, описывающий положение примеси,  $z_0$  - ее вертикальная координата. Здесь нужно считать, что  $J(\mathbf{r})$  в микроскопическом Гамильтониане медленно меняется на атомарных масштабах, но быстро - на масштабе огибающих

функций.

Константы связи здесь определяются через огибающие функции, взятые на вертикальной координате примеси  $z = z_0$ , следующим образом (см. [13]):

$$J_0 = \frac{i\sqrt{3}\beta}{2} f_3^1(z_0) \overline{f_4^1(z_0)}, \quad J_1 = \frac{\alpha}{2} |f_1^1(z_0)|^2 + \frac{\beta}{2} |f_4^1(z_0)|^2$$

$$J_2 = \frac{3\beta}{2} |f_3^1(z_0)|^2, \quad J_{mix} = J_1 + J_0^2/J_2$$

Здесь  $\alpha$  и  $\beta$  - параметры, характеризующие силу связи спина электрона (с ветви  $\Gamma_6$  и  $\Gamma_8$  соответственно) со спином примеси.

Обратим внимание, что для примеси, расположенной в центре квантовой ямы из нечетности  $f_4^1(z)$  относительно  $z \rightarrow -z$  следует, что  $J_0 = 0$  и  $J_{mix} = J_1$ .

Стоит также заметить, что огибающие функции  $f_i^1$  можно выбрать так, чтобы константы связи  $J_i$  были вещественными.

## Глава 2

# Модель двумерного топологического изолятора

В данной главе пойдет речь об упрощенной модели двумерного топологического изолятора, в которой далее будет выполняться расчет РККИ взаимодействия.

С точки зрения Гамильтониана ВНZ упрощение состоит в рассмотрении случая  $B = 0$  и  $D = 0$  (см. уравнение (1.9)). При этом, спиновая структура матрицы примеси остается неизменной. В итоге, речь идет о следующей модели

$$H = \begin{pmatrix} M & Ak_+ & 0 & 0 \\ Ak_- & -M & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M & -Ak_- \\ 0 & 0 & -Ak_+ & -M \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

$$\mathcal{V} = \begin{pmatrix} J_1 S_z & -iJ_0 S_+ & J_{mix} S_- & 0 \\ iJ_0 S_- & J_2 S_z & 0 & 0 \\ J_{mix} S_+ & 0 & -J_1 S_z & -iJ_0 S_- \\ 0 & 0 & iJ_0 S_+ & -J_2 S_z \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

в которой  $H$  - Гамильтониан электронов, а  $\mathcal{V}$  - Гамильтониан взаимодействия спина электрона со спином примеси; здесь  $M$  и  $A$  - величины, не зависящие от  $k$ , а  $k_\pm = k_x \pm ik_y$ . Вычисление будет вестись в безразмерных единицах, введенных следующим образом

$$\frac{Ak}{|M|} \rightarrow k, \quad \frac{x|M|}{A} \rightarrow x, \quad \frac{y|M|}{A} \rightarrow y, \quad \frac{H}{|M|} \rightarrow H, \quad \frac{|M|J_i}{A^2} \rightarrow J_i$$

то есть длины измеряются в единицах  $A/|M|$ , а энергии измеряются в щели  $|M|$ . Спектр в этой модели  $\varepsilon_\pm(k) = \pm\sqrt{1 + k^2}$

Встает вопрос о том, как корректно описать краевые состояния в этой модели. Дело в том, что система линейна, и открытое граничное условия немедленно приводят к тождественному равенству нулю волновой функции всюду.

Стоит заметить, что впервые вопрос о краевых состояниях решался в сходной модели в статье [18] Волкова и Панкратова. Они рассмотрели Гамильтониан вида

$$H = \begin{pmatrix} \hat{0} & iM + (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}) \\ -iM + (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}) & \hat{0} \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

для контакта двух трехмерных полупроводников и показали, что для щели  $M = M(\mathbf{r}_\perp)$ , зависящей только от расстояния до контакта произвольным, испытывающим изменение

знака в некоторой точке, образом, *всегда* присутствует набор краевых состояний с линейным (бесщелевым) спектром в плоскости.

Мы используем аналогичный подход к описанию краевых состояний в нашем случае. Допустим, что топологический изолятор занимает полупространство  $x < 0$ . Тогда  $k_x$  больше не является хорошим квантовым числом - вместо него нужно использовать  $-i\partial_x$ . Тогда

$$H = \begin{pmatrix} h(-i\partial_x, k_y) & \hat{0} \\ \hat{0} & h^*(-i\partial_x, -k_y) \end{pmatrix}, \quad h(-i\partial_x, -k_y) = \begin{pmatrix} -m(x) & -i\partial_x + ik_y \\ -i\partial_x - ik_y & m(x) \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

где  $m(x) = 1$  при  $x < 0$ . Стоит отметить, что в терминах (2.1)  $m$  соответствует  $-M$ . Мы будем интересоваться в контакте с инверсией зон, который обеспечит существование краевых состояний. Значит, будем считать  $m(x) < 0$  в полупространстве  $x > 0$ . Кроме того, вычисления будем вести в модели непоницаемого барьера. То есть, при  $x > 0$  работать в пределе  $m(x) = -\Delta$ ,  $\Delta \rightarrow +\infty$ . Такую конфигурацию можно рассматривать как контакт топологического изолятора с полупроводником, щель которого велика по сравнению с щелью в спектре объемных состояний топологического изолятора.

Далее встает два вопроса:

- Как устроены краевые состояния в этой модели?
- Как модифицируются объемные состояния за счет наличия края?

Следующий раздел посвящен ответам на них.

## 2.1 Собственные состояния

Итак, мы интересуемся структурой электронных состояний в топологическом изоляторе. С одной стороны, поскольку речь идет об инвертированном контакте, имеются краевые состояния. С другой стороны, присутствие края оказывает влияние на объемные состояния. Поэтому следующий шаг состоит в том, чтобы решить уравнение Шрёдингера и описать два класса этих собственных функций.

Для начала заметим, что уравнение Шрёдингера можно записать в виде

$$\partial_x^2 \psi_1 + (\varepsilon^2 - m(x)^2 - k_y^2) \psi_1 = -m'(x) \frac{\partial_x \psi_1}{\varepsilon - m(x)}, \quad \psi_2 = -i \frac{\partial_x + k_y}{\varepsilon - m(x)} \psi_1 \quad (2.5)$$

где  $\varepsilon$  - энергия, а

$$m'(x) = -(1 + \Delta) \delta(x)$$

Стоит заметить, что выражение  $\frac{\partial_x \psi_1}{\varepsilon - m(x)}$  непрерывно на границе  $x = 0$ , поскольку оно пропорционально  $\psi_2$  в соответствии с (2.5).

Итак, рассмотрим краевые и объемные решения этого уравнения.

### 2.1.1 Краевые состояния

Рассмотрим решения для верхнего блока Гамильтонина, локализованные на краю. Эти состояния отвечают положительной проекции момента на ось  $z$ , перпендикулярную поверхности топологического изолятора (в терминах Гамильтониана BHZ, они собраны из состояний  $|E_1, +\rangle$  и  $|H_1, +\rangle$ ). В пределе большого  $\Delta$  требование затухания волновой

функции в толще имеет вид  $\varepsilon^2 < 1 + k_y^2$ .

Непрерывность  $\psi_1$  приводит к следующей форме решений:

$$\psi_1(x) = \theta(x)e^{-\sqrt{\Delta^2+k_y^2-\varepsilon^2}x} + \theta(-x)e^{\sqrt{1+k_y^2-\varepsilon^2}x}$$

В тоже время, непрерывность  $\psi_2$  приводит к условию, определяющему энергию

$$\frac{\sqrt{1+k_y^2-\varepsilon^2}+k_y}{\varepsilon-1} = -\frac{\sqrt{\Delta^2+k_y^2-\varepsilon^2}-k_y}{\Delta+\varepsilon}$$

С одной стороны видно, что при  $\Delta < 0$  уравнение несовместно. Это значит, что никаких краевых состояний в случае неинвертированного контакта нет - что и следовало ожидать. С другой стороны, в пределе  $\Delta \rightarrow +\infty$  у этого уравнения имеется решение  $\varepsilon = -k_y$ .

Итак, в рассматриваемом пределе краевое состояние с отрицательной дисперсией и положительной проекцией углового момента имеет вид:

$$\psi^{edge,\uparrow}(\mathbf{r}) = \theta(-x) \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \frac{e^{ik_y y}}{\sqrt{2\pi}} e^x \quad (2.6)$$

Аналогично получается решение для нижнего блока с положительной дисперсией  $\varepsilon = k_y$  и отрицательной проекцией углового момента:

$$\psi^{edge,\downarrow}(\mathbf{r}) = \theta(-x) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ -i \end{pmatrix} \frac{e^{ik_y y}}{\sqrt{2\pi}} e^x \quad (2.7)$$

Решение  $\psi^{edge,\downarrow}$  получается из  $\psi^{edge,\uparrow}$  обращением времени.

## 2.1.2 Объемные состояния в присутствии края

Следующий шаг состоит в рассмотрении объемных состояний. Для начала, рассмотрим состояния с положительной проекцией момента (отвечающие верхнему блоку Гамильтониана (2.4)). Соответствующие функции, как и в случае краевых состояний, помечены верхним индексом  $\uparrow$  (состояния для нижнего блока помечены  $\downarrow$ ).

Мы ищем осциллирующие решения (2.5). То есть речь идет о решениях с энергиями  $\varepsilon^2 > 1 + k_y^2$ . Обозначим  $\varepsilon^2 - 1 - k_y^2 = k_x^2$  и  $k^2 = k_x^2 + k_y^2$ .

Начнем с решения, обладающего энергией  $\varepsilon = \sqrt{1+k^2}$ . В области  $x < 0$   $\psi_1(x) = Ae^{ik_x x} + Be^{-ik_x x}$ . В области  $x > 0$   $\psi_1(x) = e^{-\sqrt{\Delta^2-1-k_y^2}x}$ . Сшивка волновой функции на границе  $x = 0$  в пределе  $\Delta \rightarrow +\infty$  приводит к двум условиям:

$$A + B = 1, \quad \frac{ik_x(A - B) + k_y(A + B)}{\sqrt{1+k^2} - 1} = -1$$

Аналогичные условия легко получаются для решения, отвечающего нижней ветви спектра объемных состояний с  $\varepsilon = -\sqrt{1+k^2}$ , а также для решений, отвечающих нижнему блоку Гамильтониана.

Далее, решая уравнения на  $A$  и  $B$  и используя соотношения на связь между  $\psi_1$  и  $\psi_2$ ,

получаем выражения для объемных состояний. Их следует нормировать на  $\delta$ -функцию. По этой причине удобно ввести функции

$$f_x(\mathbf{k}) = \frac{1}{2\sqrt{\sqrt{1+k^2}(\sqrt{1+k^2}+k_y)}} \left( e^{ik_xx}(k_+ + i(\sqrt{1+k^2}-1)) + \text{h.c.} \right) \quad (2.8)$$

$$g_x(\mathbf{k}) = \frac{1}{2\sqrt{\sqrt{1+k^2}(\sqrt{1+k^2}+k_y)}} \left( e^{ik_xx}(k_- - i(\sqrt{1+k^2}+1)) + \text{h.c.} \right) \quad (2.9)$$

В итоге, нормированные решения записываются следующим образом

$$\psi_{+}^{bulk,\uparrow}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} f_x(\mathbf{k}) \\ ig_x(\mathbf{k}) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \frac{e^{ik_y y}}{2\pi}, \quad \psi_{-}^{bulk,\uparrow}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} -g_x(-\mathbf{k}) \\ -if_x(-\mathbf{k}) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \frac{e^{ik_y y}}{2\pi} \quad (2.10)$$

Нижней индекс  $\pm$  обозначает ветвь в спектре, к которой принадлежит решение:  $\varepsilon = \pm\sqrt{1+k^2}$ . Аналогично для нижнего блока:

$$\psi_{+}^{bulk,\downarrow}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -f_x(-\mathbf{k}) \\ ig_x(-\mathbf{k}) \end{pmatrix} \frac{e^{ik_y y}}{2\pi}, \quad \psi_{-}^{bulk,\downarrow}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ g_x(\mathbf{k}) \\ -if_x(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \frac{e^{ik_y y}}{2\pi} \quad (2.11)$$

## 2.2 Функция Грина

При рассмотрении РККИ взаимодействия очень важна функция Грина задачи. Мы будем работать в мацубаровском представлении. Под мацубаровской функцией Грина понимается

$$G_{\alpha\beta}(\tau, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\langle T_\tau \Psi_\alpha(\tau, \mathbf{r}) \bar{\Psi}_\beta(0, \mathbf{r}') \rangle \quad (2.12)$$

где

$$\Psi_\alpha(\tau, \mathbf{r}) = e^{\tau(\mathcal{H}-\mu N)} \Psi_\alpha(\mathbf{r}) e^{-\tau(\mathcal{H}-\mu N)}, \quad \bar{\Psi}_\beta(\tau, \mathbf{r}) = e^{\tau(\mathcal{H}-\mu N)} \Psi_\beta^\dagger(\mathbf{r}) e^{-\tau(\mathcal{H}-\mu N)}$$

здесь  $\Psi_\alpha(\mathbf{r})$  - оператор уничтожения электрона с моментом  $\alpha$  ( $\alpha$  пробегает значения  $-3/2, -1/2, 1/2, 3/2$ ) в точке  $\mathbf{r}$ ,  $\mu$  - химический потенциал,  $\mathcal{H}$  - вторично-квантованная версия Гамильтониана (2.1), а  $N$  - оператор числа частиц в системе.

Мы рассматриваем систему без взаимодействия между электронами. Удобный способ вычислить функцию Грина в этом случае - использовать представление Леманна. Оно выражает функцию Грина в координатно-энергетическом представлении через одночастичные состояния следующим образом

$$G_{\alpha\beta}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_m \frac{\psi_\alpha^m(\mathbf{r}) \psi_\beta^{m*}(\mathbf{r}')}{i\varepsilon - (\varepsilon_m - \mu)} \quad (2.13)$$

Отсюда сразу же становится ясно, что функцию Грина можно разбить на два слагаемых - функцию Грина краевых состояний и функцию Грина объемных состояний. При этом, стоит иметь в виду, что последняя из них в присутствии края не совпадает с обычной объемной функцией Грина, определенной для бесконечного образца.

Итак,

$$G(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = G^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') + G^{edge}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (2.14)$$

В первом слагаемом подразумевается суммирование только по объемным состояниям, а во втором - только по краевым.

В тоже время, функцию Грина краевых состояний удобно разделить на две части - связанную с  $\uparrow$ -состояниями и с  $\downarrow$ -состояниями:

$$G^{\text{edge}}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = G^\uparrow(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') + G^\downarrow(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$$
 (2.15)

Следующие подразделы посвящены работе с этими функциями.

### 2.2.1 Функция Грина краевых состояний

Начнем с того, что рассмотрим функцию Грина краевых состояний с положительной проекцией момента. Выражение для нее имеет вид

$$G^\uparrow(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int \frac{dk_y}{2\pi} \frac{e^{ik_y(y-y')} e^{x+x'} \theta(-x) \theta(-x')}{i\varepsilon + \mu + k_y} \begin{pmatrix} 1 & -i & 0 & 0 \\ i & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.16)$$

после элементарного интегрирования в комплексной плоскости, сводящееся к

$$G^\uparrow(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = ie^{-i\mu(y-y')} e^{x+x'} e^{\varepsilon(y-y')} \theta(-x) \theta(-x') (\theta(y-y') \theta(-\varepsilon) - \theta(y'-y) \theta(\varepsilon)) \begin{pmatrix} 1 & -i & 0 & 0 \\ i & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Аналогично получается результат для краевых состояний с отрицательным моментом:

$$G^\downarrow(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = ie^{i\mu(y-y')} e^{x+x'} e^{-\varepsilon(y-y')} \theta(-x) \theta(-x') (-\theta(y-y') \theta(\varepsilon) + \theta(y'-y) \theta(-\varepsilon)) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & i \\ 0 & 0 & -i & 1 \end{pmatrix}$$

Итак, мы получили выражение для функции Грина краевых состояний. Теперь следует обсудить функцию Грина объемных состояний.

### 2.2.2 Функция Грина объемных состояний

Выполнив суммирование по объемным состояниям, приходим к следующему результату:

$$\begin{aligned} & G^{\text{bulk}}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \\ & \int_0^{+\infty} \frac{dk_x}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_y}{2\pi} \frac{e^{ik_y Y}}{i\varepsilon + \mu - \sqrt{1+k^2}} \begin{pmatrix} f_x(\mathbf{k})f_{x'}(\mathbf{k}) & -if_x(\mathbf{k})g_{x'}(\mathbf{k}) & 0 & 0 \\ ig_x(\mathbf{k})f_{x'}(\mathbf{k}) & g_x(\mathbf{k})g_{x'}(\mathbf{k}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & f_x(-\mathbf{k})f_{x'}(-\mathbf{k}) & if_x(-\mathbf{k})g_{x'}(-\mathbf{k}) \\ 0 & 0 & -ig_x(-\mathbf{k})f_{x'}(-\mathbf{k}) & g_x(-\mathbf{k})g_{x'}(-\mathbf{k}) \end{pmatrix} + \\ & + \int_0^{+\infty} \frac{dk_x}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_y}{2\pi} \frac{e^{ik_y Y}}{i\varepsilon + \mu + \sqrt{1+k^2}} \begin{pmatrix} g_x(-\mathbf{k})g_{x'}(-\mathbf{k}) & -ig_x(-\mathbf{k})f_{x'}(-\mathbf{k}) & 0 & 0 \\ if_x(-\mathbf{k})g_{x'}(-\mathbf{k}) & f_x(-\mathbf{k})f_{x'}(-\mathbf{k}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & g_x(\mathbf{k})g_{x'}(\mathbf{k}) & ig_x(\mathbf{k})f_{x'}(\mathbf{k}) \\ 0 & 0 & -if_x(\mathbf{k})g_{x'}(\mathbf{k}) & f_x(\mathbf{k})f_{x'}(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.17)$$

здесь под  $Y$  понимается  $y - y'$ . Функции  $f_x(\mathbf{k})$  и  $g_x(\mathbf{k})$  определены в (2.8) и (2.9). Стоит обратить внимание, что интегрирование здесь ведется только по  $k_x > 0$  - из-за присутствия непроницаемого браьера это квантовое число принимает только значения на полупрямой.

Итак, функция Грина полностью описана. Теперь можно перейти непосредственно к рассмотрению косвенного обменного взаимодействия в двумерном топологическом изоляторе.

# Глава 3

## Косвенное обменное взаимодействие на краю двумерного топологического изолятора

### 3.1 РКИ взаимодействие на языке диаграммной техники

Для того, чтобы описать взаимодействие магнитных примесей, используется следующий подход: мы вычисляем поправку к термодинамическому потенциалу, связанную с наличием двух магнитных примесей в системе. В этой поправке содержится несколько слагаемых. За взаимодействие примесей отвечает слагаемое второго порядка по константе их взаимодействия с электронами, которое содержит спины обеих примесей. Итак, начинаем с Гамильтонана взаимодействия электронов с примесями  $A$  и  $B$  (1.21):

$$V_{AB}^{2D} = \mathcal{V}_A \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A) + \mathcal{V}_B \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_B) \quad (3.1)$$

Соответствующий многочастичный Гамильтониан

$$\mathcal{H}_{imp} = \int d^2r \Psi_\alpha^+(\mathbf{r}) (\mathcal{V}_A^{\alpha\beta} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A) + \mathcal{V}_B^{\alpha\beta} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_B)) \Psi_\beta(\mathbf{r}) \quad (3.2)$$

Поправка к термодинамическому потенциалу дается известной (см. [20]) формулой матцубаровской техники

$$\Delta\Omega = -T (\langle \mathcal{S}(1/T) \rangle_c - 1) \quad (3.3)$$

где  $\mathcal{S}$ -матрица определена как

$$\mathcal{S}(\tau) = T_\tau \exp \left( - \int_0^\tau d\tau' \mathcal{H}_{imp}(\tau') \right) \quad (3.4)$$

и символ  $c$  в индексе обозначает суммирование только по связным диаграммам.

Как обычно

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

Здесь  $\mathcal{H}$  - вторично-квантованная версия электронного Гамильтониана (2.1).

Слагаемого первого порядка по спину примеси быть не может, так как мы рассматриваем задачу, в которой электронный Гамильтониан обладает симметрией по отношению к обращению времени.

Рассмотрим слагаемое второго порядка, которое связывает примесь  $A$  с примесью  $B$ . Оно имеет вид

$$\Delta\Omega_{int} = T\mathcal{V}_A^{\alpha\beta}\mathcal{V}_B^{\gamma\delta} \int_0^{\frac{1}{T}} d\tau_1 \int_0^{\frac{1}{T}} d\tau_2 G_{\beta\gamma}(\tau_1 - \tau_2, \mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) G_{\delta\alpha}(\tau_2 - \tau_1, \mathbf{r}_B, \mathbf{r}_A), \quad (3.5)$$

соответствующая ему диаграмма:

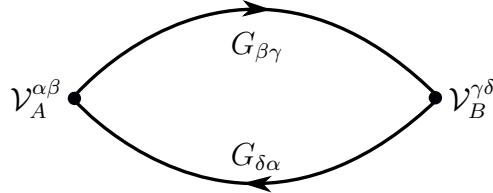


Рис. 3.1: Диаграмма, описывающая взаимодействие магнитных примесей

В дальнейшем, нашей целью будет вычисление этой величины. Оказывается удобнейвести расчет в координатно-энергетическом представлении. Поэтому превратим интеграл по мнимому времени в сумму по мацубаровским частотам. В итоге,

$$\Delta\Omega_{int} = \mathcal{V}_A^{\alpha\beta}\mathcal{V}_B^{\gamma\delta}\Pi_{\beta\gamma,\delta\alpha} \quad (3.6)$$

где поляризационный оператор  $\Pi$  определен как

$$\Pi_{\beta\gamma,\delta\alpha} = T \sum_n G_{\beta\gamma}(i\varepsilon_n, \mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) G_{\delta\alpha}(i\varepsilon_n, \mathbf{r}_B, \mathbf{r}_A) \quad (3.7)$$

В основном мы будем интересоваться пределом  $T \rightarrow 0$ , поэтому можно заменить  $i\varepsilon_n \rightarrow i\varepsilon$  и  $\sum_n \rightarrow \int \frac{d\varepsilon}{2\pi}$ .

В дальнейшем предполагается, что химический потенциал лежит в щели. В безразмерных единицах это значит  $|\mu| < 1$ .

Из формулы (3.7) видно, что в РККИ взаимодействии магнитных примесей вблизи края будет присутствовать несколько различных по природе слагаемых.

Действительно,  $G(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = G^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') + G^{edge}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ , а значит, все выражение для поправки к термодинамическому потенциалу распадается на слагаемое, которое содержит произведение двух объемных функций Грина, слагаемое, которое содержит произведение двух краевых функций Грина, а также перекрестное слагаемое - оно содержит и объемную функцию Грина, и краевую:

$$\begin{aligned} \Pi_{\beta\gamma,\delta\alpha} = & T \underbrace{\sum_n G_{\beta\gamma}^{bulk}(i\varepsilon_n, \mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) G_{\delta\alpha}^{bulk}(i\varepsilon_n, \mathbf{r}_B, \mathbf{r}_A)}_{\text{РККИ за счет объемных состояний, } \Pi_{\beta\gamma,\delta\alpha}^{bb}} + T \underbrace{\sum_n G_{\beta\gamma}^{edge}(i\varepsilon_n, \mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) G_{\delta\alpha}^{edge}(i\varepsilon_n, \mathbf{r}_B, \mathbf{r}_A)}_{\text{РККИ за счет краевых состояний, } \Pi_{\beta\gamma,\delta\alpha}^{ee}} + \\ & + T \underbrace{\sum_n G_{\beta\gamma}^{bulk}(i\varepsilon_n, \mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) G_{\delta\alpha}^{edge}(i\varepsilon_n, \mathbf{r}_B, \mathbf{r}_A) + T \sum_n G_{\beta\gamma}^{edge}(i\varepsilon_n, \mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) G_{\delta\alpha}^{bulk}(i\varepsilon_n, \mathbf{r}_B, \mathbf{r}_A)}_{\text{интерференционный РККИ, } \Pi_{\beta\gamma,\delta\alpha}^{be} + \Pi_{\beta\gamma,\delta\alpha}^{eb}} \end{aligned} \quad (3.8)$$

Последнее слагаемое мы будем называть интерференционным РККИ.

В дальнейшем нашей целью будет исследование каждого из этих слагаемых по отдельности, а также их сравнение по величине в различных конфигурациях примесей.

## 3.2 РККИ за счет краевых состояний

Прежде чем начать вычисление, введем некоторые обозначения. Будем обозначать компоненты двумерного радиус-вектора примеси следующим образом  $\mathbf{r}_{A/B} = (x_{A/B} \ y_{A/B})^T$ . Кроме того, будем предполагать, что  $y_A > y_B$  и обозначать  $\mathbf{R} = \mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B$ ,  $Y = y_A - y_B$ ,  $X = x_A - x_B$ , а также  $\tilde{X} = x_A + x_B$  и  $\tilde{R} = \sqrt{\tilde{X}^2 + Y^2}$ .  $\tilde{R}$  будет часто встречаться в конечных ответах, так как система с краем не обладает вращательной инвариантностью. Эту величину можно интерпретировать как расстояния от одной примеси до изображения другой.

Итак, в этом разделе мы описываем РККИ взаимодействие за счет краевых состояний. Стоит обратить внимание, что в этом слагаемом конечность температуры в (3.1) учитывается элементарно - достаточно просуммировать геометрическую прогрессию по мапубаровским частотам.

Простое вычисление приводит к следующему выражению для произвольного элемента поляризационного оператора:

$$\Pi_{\beta\gamma,\delta\alpha}^{ee} = -\frac{Te^{2\tilde{X}}}{2\sinh Y/L_T} \left( M_{\uparrow}^{\beta\gamma} M_{\downarrow}^{\delta\alpha} e^{-2i\mu Y} + M_{\downarrow}^{\beta\gamma} M_{\uparrow}^{\delta\alpha} e^{2i\mu Y} \right) \quad (3.9)$$

где

$$M_{\uparrow} = \begin{pmatrix} 1 & -i & 0 & 0 \\ i & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad M_{\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & i \\ 0 & 0 & -i & 1 \end{pmatrix},$$

а тепловая длина в безразмерных единицах равна  $L_T = \frac{1}{2\pi T}$ .

Это выражение позволяет сразу же выписать ответ для РККИ взаимодействия за счет краевых состояний:

$$H_{\text{exchange}}^{ee} = -\frac{Te^{2\tilde{X}}}{\sinh Y/L_T} J_{mix}^A J_{mix}^B [\cos 2\mu Y (\mathbf{S}_{||}^A \cdot \mathbf{S}_{||}^B) + \sin 2\mu Y [\mathbf{S}^A \times \mathbf{S}^B]_z] \quad (3.10)$$

Во-первых, стоит заметить, что полученный ответ находится в согласии с (1.4) (результат работы [14]) в пределе нулевой температуры и примесей, расположенных в точности на краю.

Во-вторых, видно, что РККИ взаимодействие осуществляется только за счет  $J_{mix}$  компонент матрицы примеси. Этого результата следовало ожидать. Действительно, только это слагаемое в Гамильтониане примеси способно перевернуть "спин" электрона, поскольку это единственный междублочный элемент. Если же  $J_{mix}^{A/B} = 0$ , то примеси не могут изменить направления момента электрона на краю, а значит, не могут изменить направления его движения.

Рассмотрим, кроме того, масштабы тепловой длины. Величина щели в спектре объемных состояний  $\sim 10$  meV для квантовой ямы толщиной  $d \simeq 5.5$  nm. В температурных единицах это соответствует  $\sim 100$  K. Поэтому при температурах  $\ll 100$  K ее конечность не оказывает влияния на РККИ взаимодействие, обусловленное объемными состояниями и интерференцией - отклонения от нуль-температурного предела подавлены по параметру  $e^{-|M|/T}$ . В тоже время для краевых состояний подавления по величине не происходит - возникает лишь зарезка по расстоянию. Оценим ее для  $T = 1$  K  $\simeq 10^{-4}$  eV и  $A \simeq 0.35$  eV · nm. В размерных единицах  $L_T = A/2\pi T \sim 50$  nm. В тоже время, при  $T = 0$  взаимодействие дальнодействующее. Поэтому при реалистичных размерах образца  $\sim 1$  μm конечность температуры может оказаться существенной, например, для

магнитной фазы системы примесей вблизи края.

### 3.3 РККИ за счет объемных состояний

Теперь рассмотрим то, как устроено косвенное обменное взаимодействие за счет объемных состояний. Как уже упоминалось, присутствие края изменяет структуру объемных состояний, если сравнивать их с состояниями в бесконечном образце. Поэтому стоит ожидать, что следы этого обстоятельства будут видны в РККИ взаимодействии.

Начнем с того, что проанализируем какой-либо конкретный элемент поляризационного оператора, а именно  $\Pi_{11,33}^{bb}$ . Выражение для него имеет вид

$$\begin{aligned} \Pi_{11,33}^{bb} = & \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} G_{11}^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) G_{33}^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}_B, \mathbf{r}_A) = \frac{1}{4} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \frac{dk_x}{2\pi} \frac{dk_y}{2\pi} \frac{dz_x}{2\pi} \frac{dz_y}{2\pi} e^{ik_y Y} e^{-iz_y Y} \times \\ & \times \left( \frac{f_{x_A}(\mathbf{k}) f_{x_B}(\mathbf{k})}{i\varepsilon + \mu - \sqrt{1+k^2}} + \frac{g_{x_A}(-\mathbf{k}) g_{x_B}(-\mathbf{k})}{i\varepsilon + \mu + \sqrt{1+k^2}} \right) \left( \frac{f_{x_A}(-\mathbf{z}) f_{x_A}(-\mathbf{z})}{i\varepsilon + \mu - \sqrt{1+z^2}} + \frac{g_{x_A}(\mathbf{z}) g_{x_B}(\mathbf{z})}{i\varepsilon + \mu + \sqrt{1+z^2}} \right) \end{aligned} \quad (3.11)$$

Здесь мы использовали четность подынтегральной функции  $f_{x_A}(-k_x, k_y) f_{x_B}(-k_x, k_y) = f_{x_A}(k_x, k_y) f_{x_B}(k_x, k_y)$  (аналогично для  $g$ ).

Легко заметить, что интеграл по  $k$  здесь равняется интегралу по  $z$ .

В произведении скобок имеется четыре слагаемых. Два из них исчезают при интегрировании по  $\varepsilon$  (полюсы лежат по одну сторону от контура интегрирования). Два оставшихся слагаемых равны. Проинтегрировав по  $\varepsilon$  и воспользовавшись  $1/a = \int_0^{+\infty} e^{-at} dt$  для  $a > 0$ , получаем упрощенное выражение:

$$\Pi_{11,33}^{bb} = -\frac{1}{2} \int_0^{+\infty} dt \int \frac{dk_x dk_y}{(2\pi)^2} f_{x_A}(\mathbf{k}) f_{x_B}(\mathbf{k}) e^{ik_y Y - t\sqrt{1+k^2}} \int \frac{dz_x dz_y}{(2\pi)^2} g_{x_A}(-\mathbf{z}) g_{x_B}(-\mathbf{z}) e^{iz_y Y - t\sqrt{1+z^2}} \quad (3.12)$$

Рассмотрим часть этого интеграла

$$I_1 = \int dk_x dk_y f_{x_A}(\mathbf{k}) f_{x_B}(\mathbf{k}) e^{ik_y Y - t\sqrt{1+k^2}} \quad (3.13)$$

После подстановки функций  $f$  он разбивается на несколько слагаемых

$$\begin{aligned} I_1 = & \frac{1}{4} \int dk_x dk_y \frac{e^{ik_y Y - t\sqrt{1+k^2}}}{\sqrt{1+k^2}(\sqrt{1+k^2} + k_y)} (e^{ik_x \tilde{X}} (k_+ + i(\sqrt{1+k^2} - 1))^2 + \\ & + e^{-ik_x \tilde{X}} (k_- - i(\sqrt{1+k^2} - 1))^2 + [e^{ik_x X} + e^{-ik_x X}] |k_+ + i(\sqrt{1+k^2} - 1)|^2) \end{aligned} \quad (3.14)$$

Каждый из интегралов можно вычислить методом перевала в комплексной плоскости в пределе  $R, \tilde{R} \gg 1$ . При таком вычислении нужно сперва раскрыть модули (например,  $|k_+ + i(\sqrt{1+k^2} - 1)|^2 = k_x^2 + (k_y + \sqrt{1+k^2} - 1)^2$ ), и только потом выходить в комплексные  $k$ . Используем ответ для интеграла общего вида:

$$\int dk_x dk_y F(\mathbf{k}) e^{ik_x x + ik_y y - t\sqrt{1+k^2}} = \frac{2\pi t}{r^2} F(\mathbf{k}_0) e^{-\frac{t^2}{2r} - r}$$

Здесь  $\mathbf{k}_0 = \begin{pmatrix} i\frac{x}{r} \frac{1}{\sqrt{1+\frac{t^2}{r^2}}} \\ i\frac{y}{r} \frac{1}{\sqrt{1+\frac{t^2}{r^2}}} \end{pmatrix}$ . Этот результат верен в пределе  $1 \ll t \ll r$ ,  $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ .

Вернемся теперь к вычислению поляризационного оператора.

$$I_1 = \frac{i\pi}{Y} \left( \frac{\tilde{X} + iY}{\tilde{R}} - 1 \right)^2 \exp \left[ -\frac{t^2}{2\tilde{R}} - \tilde{R} \right] - \frac{2\pi}{R} \exp \left[ -\frac{t^2}{2R} - R \right] \quad (3.15)$$

Аналогичное вычисление для

$$I_2 = \int dz_x dz_y g_{x_A}(-\mathbf{z}) g_{x_B}(-\mathbf{z}) e^{iz_y Y - t\sqrt{1+z^2}} \quad (3.16)$$

приводит к следующему результату

$$I_2 = -\frac{i\pi}{Y} \left( \frac{\tilde{X} + iY}{\tilde{R}} - 1 \right)^2 \exp \left[ -\frac{t^2}{2\tilde{R}} - \tilde{R} \right] + \frac{2\pi}{R} \exp \left[ -\frac{t^2}{2R} - R \right] = -I_1 \quad (3.17)$$

Вычисляя гауссовые интегралы по  $t$  получаем

$$\begin{aligned} \Pi_{11,33}^{bb} = & \frac{1}{16} \left( \frac{1}{\pi R} \right)^{3/2} e^{-2R} - \frac{1}{64} \sqrt{\frac{\tilde{R}}{Y}} \left( \frac{1}{\pi Y} \right)^{3/2} \left( \frac{\tilde{X} + iY}{\tilde{R}} - 1 \right)^4 e^{-2\tilde{R}} - \\ & - \frac{i}{16} \frac{1}{Y R \pi^{3/2}} \sqrt{\frac{2R\tilde{R}}{R + \tilde{R}}} \left( \frac{\tilde{X} + iY}{\tilde{R}} - 1 \right)^2 e^{-R - \tilde{R}} \end{aligned} \quad (3.18)$$

Итак, в поляризационном операторе есть три слагаемых, каждое из которых спадает со своей экспонентой по мере увеличения расстояния между примесями. Стоит отметить, что второе и третье слагаемые исчезают при удалении примесей от края. Их можно интерпретировать как взаимодействие одной примеси с изображением другой. Видно, что они, кроме того, обладают нетривиальной угловой структурой, которая связана с отсутствием вращательной инвариантности.

Рассмотрим теперь другие элементы поляризационного оператора.

Обозначим  $n_+ = \frac{X+iY}{R}$  и  $\tilde{n}_+ = \frac{\tilde{X}+iY}{\tilde{R}}$ . Помимо интегралов, которые сводятся к  $I_1$  и  $I_2$ , встречается

$$\begin{aligned} I_3 &= \int dk_x dk_y e^{ik_y Y - t\sqrt{1+t^2}} f_{x_A}(\mathbf{k}) g_{x_B}(\mathbf{k}) = \\ &= -n_+ \frac{2\pi}{R} \exp \left[ -\frac{t^2}{2R} - R \right] + \frac{i\tilde{R}}{2Y} \frac{2\pi}{\tilde{R}} \exp \left[ -\frac{t^2}{2\tilde{R}} - \tilde{R} \right] |\tilde{n}_+ - 1|^2 \end{aligned} \quad (3.19)$$

Для компактной записи ответа введем функцию

$$\mathcal{F}(R_1, R_2) = \frac{1}{16\pi^{3/2}} e^{-R_1 - R_2} \sqrt{\frac{2}{R_1 R_2 (R_1 + R_2)}}$$

Тогда другие элементы поляризационного оператора:

$$\Pi_{11,11} = \Pi_{22,22} = \Pi_{33,33} = \Pi_{44,44} = -\Pi_{11,44} = -\Pi_{44,11} = -\Pi_{22,33} = -\Pi_{33,22} =$$

$$\mathcal{F}(R, R) + \frac{\tilde{R}^2}{4Y^2} |\tilde{n}_+ - 1|^4 \mathcal{F}(\tilde{R}, \tilde{R}) + i \frac{\tilde{R}}{2Y} ((\tilde{n}_- - 1)^2 - (\tilde{n}_+ - 1)^2) \mathcal{F}(R, \tilde{R}); \quad (3.20)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{11,33} = \Pi_{44,22} = \Pi_{33,11}^* = \Pi_{22,44}^* = -\Pi_{11,22} = -\Pi_{44,33} = -\Pi_{22,11}^* = -\Pi_{33,44}^* = \\ \mathcal{F}(R, R) - \frac{\tilde{R}^2}{4Y^2}(\tilde{n}_+ - 1)^4 \mathcal{F}(\tilde{R}, \tilde{R}) - i \frac{\tilde{R}}{Y}(\tilde{n}_+ - 1)^2 \mathcal{F}(R, \tilde{R}); \end{aligned} \quad (3.21)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{12,12} = \Pi_{43,43} = -\Pi_{12,43} = -\Pi_{43,21} = \Pi_{21,21}^* = \Pi_{34,34}^* = -\Pi_{21,34}^* = -\Pi_{34,21}^* = \\ n_+^2 \mathcal{F}(R, R) - \frac{\tilde{R}^2}{4Y^2} |\tilde{n}_+ - 1|^4 \mathcal{F}(\tilde{R}, \tilde{R}) - i \frac{\tilde{R}}{Y} n_+ |\tilde{n}_+ - 1|^2 \mathcal{F}(R, \tilde{R}); \end{aligned} \quad (3.22)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{21,12} = \Pi_{12,21} = \Pi_{43,34} = \Pi_{34,43} = -\Pi_{12,34} = -\Pi_{21,43} = -\Pi_{34,12} = -\Pi_{43,21} = \\ \mathcal{F}(R, R) + \frac{\tilde{R}^2}{4Y^2} |\tilde{n}_+ - 1|^4 \mathcal{F}(\tilde{R}, \tilde{R}) + i \frac{\tilde{R}}{2Y} (n_+ - n_-) |\tilde{n}_+ - 1|^2 \mathcal{F}(R, \tilde{R}); \end{aligned} \quad (3.23)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{12,11} = \Pi_{21,22}^* = \Pi_{34,33}^* = \Pi_{43,44} = \Pi_{22,12} = \Pi_{11,21}^* = -\Pi_{22,43} = -\Pi_{11,34}^* = \Pi_{33,43} = \Pi_{44,34}^* = \\ -\Pi_{12,44} = -\Pi_{21,33}^* = -\Pi_{33,12} = -\Pi_{44,21}^* = -\Pi_{43,11} = -\Pi_{34,22}^* = \\ -in_+ \mathcal{F}(R, R) - i \frac{\tilde{R}^2}{4Y^2} (\tilde{n}_- - 1)^2 |\tilde{n}_+ - 1|^2 \mathcal{F}(\tilde{R}, \tilde{R}) + \frac{\tilde{R}}{2Y} (n_+ (\tilde{n}_- - 1)^2 - |\tilde{n}_+ - 1|^2) \mathcal{F}(R, \tilde{R}); \end{aligned} \quad (3.24)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{21,11} = \Pi_{12,22}^* = \Pi_{43,33}^* = \Pi_{34,44} = \Pi_{22,21} = \Pi_{11,12}^* = -\Pi_{22,34} = -\Pi_{11,43}^* = \Pi_{33,34} = \Pi_{44,43}^* = \\ -\Pi_{21,44} = -\Pi_{12,33}^* = -\Pi_{33,21} = -\Pi_{44,12}^* = -\Pi_{34,11} = -\Pi_{43,22}^* = \\ -in_- \mathcal{F}(R, R) + i \frac{\tilde{R}^2}{4Y^2} (\tilde{n}_- - 1)^2 |\tilde{n}_+ - 1|^2 \mathcal{F}(\tilde{R}, \tilde{R}) + \frac{\tilde{R}}{2Y} (n_- (\tilde{n}_- - 1)^2 + |\tilde{n}_+ - 1|^2) \mathcal{F}(R, \tilde{R}); \end{aligned} \quad (3.25)$$

Не будем выписывать полное выражение для РКИ за счет объемных состояний, однако отметим еще раз, что в нем есть три типа слагаемых: первые затухают как  $e^{-2R}$  - этот тип взаимодействия остается, когда примеси расположены глубоко в объеме образца, вторые затухают как  $e^{-2\tilde{R}}$ , а третий - как  $e^{-R-\tilde{R}}$ . Если одна из примесей расположена в точности на границе, то эти экспоненты тождественно совпадают.

Посмотрим теперь, как устроено взаимодействие примесей вдали от края. Эффективный Гамильтониан имеет вид:

$$\begin{aligned} H_{\text{exchange}}^{bb} = 2\mathcal{F}(R, R)(J_z^A J_z^B S_z^A S_z^B - 4J_0^A J_0^B (\mathbf{S}_{||}^A \cdot \mathbf{n}) (\mathbf{S}_{||}^B \cdot \mathbf{n}) + J_{mix}^A J_{mix}^B (\mathbf{S}_{||}^A \cdot \mathbf{S}_{||}^B) - \\ - 2(J_0^A J_z^B (\mathbf{S}_{||}^A \cdot \mathbf{n}) S_z^B - J_0^B J_z^A (\mathbf{S}_{||}^B \cdot \mathbf{n}) S_z^A)) \end{aligned} \quad (3.26)$$

константы  $J_i$  определены в (1.21),  $J_z = J_1 + J_2$ , а  $\mathbf{n} = \mathbf{R}/R$ .

Подобная спиновая структура взаимодействия возникла у Галицкого и Ефимкина в работе [19] - как уже упоминалось, они рассматривали упорядочение магнитных примесей на поверхности трехмерного топологического изолятора. Кроме того, данный ответ является предельным случаем результата дипломной работы Куриловича П.Д. (см. [13]) - он получается устремлением несимметричности квантовой ямы к нулю (а также  $B = D = 0$ ).

Этот ответ содержит несколько типов слагаемых. Во-первых, это изинговский обмен. Во-вторых, это анизотропное взаимодействие в плоскости топологического изолятора. В-третьих, это изотропный обмен в плоскости. А также, это взаимодействие Дзялошинского-Мории, которое связывает компоненту спина в плоскости с  $z$ -компонентой. Это слагаемое приобретает свой стандартный вид для примесей, расположенных на одной высоте - в этом случае  $J_i^A = J_i^B = J_i$ . Тогда  $H_{DM} = -4\mathcal{F}(R, R)J_0 J_z [(\mathbf{S}^A \times \mathbf{S}^B) \times \mathbf{n}]_z$ .

Стоит отметить, что для примесей, расположенных при  $z = 0$  ответ заметно упрощается. Поскольку  $J_0$  в этом случае равно 0, а  $J_{mix} = J_1$ , получается ответ:

$$H_{\text{exchange}}^{bb} = 2\mathcal{F}(R, R)(J_z^A J_z^B S_z^A S_z^B + J_1^A J_1^B (\mathbf{S}_{||}^A \cdot \mathbf{S}_{||}^B)) \quad (3.27)$$

## 3.4 РККИ за счет интерференции краевых и объемных состояний

Теперь перейдем к описанию части РККИ взаимодействия, связанной с интерференцией между краевыми и объемными состояниями. Мы увидим, что это взаимодействие обладает рядом особенностей. В частности, его характер затухания принципиально отличается от характера затухания РККИ за счет краевых состояний и РККИ за счет объемных состояний: он напрямую зависит от положения химического потенциала, а именно, в ответе возникает множитель вида  $\exp[-\sqrt{1-\mu^2}R]$ .

Наше рассмотрение состоит в приближенном (в асимптотике больших расстояний) вычислении части поляризационного оператора вида  $\Pi_{\beta\gamma,\delta\alpha}^{be} + \Pi_{\beta\gamma,\delta\alpha}^{eb}$ . В нее входит функция Грина как краевых, так и объемных состояний. Ввиду этого обстоятельства возникают выражения вида (рассматриваем, например, элемент 11, 33)

$$\Pi_{11,33}^{be} = \frac{ie^{\tilde{X}}e^{-i\mu Y}}{2\pi} \int d\varepsilon \theta(-\varepsilon) e^{\varepsilon Y} G_{11}^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) \quad (3.28)$$

Поэтому становится удобно разобраться с функцией Грина объемных состояний в координатно-энергетическом представлении.

### 3.4.1 Функция Грина объемных состояний

Вполне ожидаемо, что функцию Грина объемных состояний можно разделить на две части, первая из которых выживает вдали от края, а вторая - исчезает. Будем говорить о первой части, как об инвариантной относительно трансляций, а о второй - как о неинвариантной. Итак:

$$G^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_i^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') + G_{ni}^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$$

Наша цель на данном этапе - вычислить каждую из этих частей. Но предварительно стоит проанализировать симметрию функции Грина. Из (2.17) для нее возможно получить следующее представление:

$$G^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \begin{pmatrix} G_{11}^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') & G_{12}^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') & 0 & 0 \\ [G_{12}^{bulk}(-i\varepsilon, \mathbf{r}', \mathbf{r})]^* & -[G_{11}^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}')]^* & 0 & 0 \\ 0 & 0 & G_{11}^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}', \mathbf{r}) & [G_{12}^{bulk}(-i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}')]^* \\ 0 & 0 & G_{12}^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}', \mathbf{r}) & -[G_{11}^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}')]^* \end{pmatrix}$$

В каждое выражение здесь химический потенциал  $\mu$  входит так, чтобы давать комбинацию вида  $i\varepsilon + \mu$ . Например, в  $-[G_{11}^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}', \mathbf{r})]^*$  следует использовать  $-\mu$  вместо  $\mu$ , чтобы он образовывал нужную комбинацию с  $i\varepsilon$ .

Итак, из симметрии ясно, что необходимо вычислить два выражения:  $G_{11}^{bulk}$  и  $G_{12}^{bulk}$  - все остальные получатся автоматически.

Начнем с  $G_i^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$  - инвариантной относительно трансляций части функции Грина. Выражение для нее можно получить точно для произвольных расстояний и энергии. Рассмотрим  $G_{i,11}^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ .

$$G_{i,11}^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int \frac{dk_x dk_y}{2(2\pi)^2} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}}{\sqrt{1+k^2}} \left( \frac{\sqrt{1+k^2}-1}{i\varepsilon+\mu-\sqrt{1+k^2}} + \frac{\sqrt{1+k^2}+1}{i\varepsilon+\mu+\sqrt{1+k^2}} \right) \quad (3.29)$$

$$\text{где } \mathbf{R} = \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x - x' \\ y - y' \end{pmatrix}$$

В первую очередь удобно вычислить интеграл по  $k_x$ . Будем предполагать, что  $X > 0$ . В противном случае можно сделать замену  $k_x \rightarrow -k_x$  и провести вычисление тем же самым образом.

Заметим, что подынтегральное выражение содержит  $\sqrt{1 + k^2}$ , а значит, в комплексной плоскости  $k_x$  имеется разрез. Мы выбираем его так, как показано на рис. 3.2.

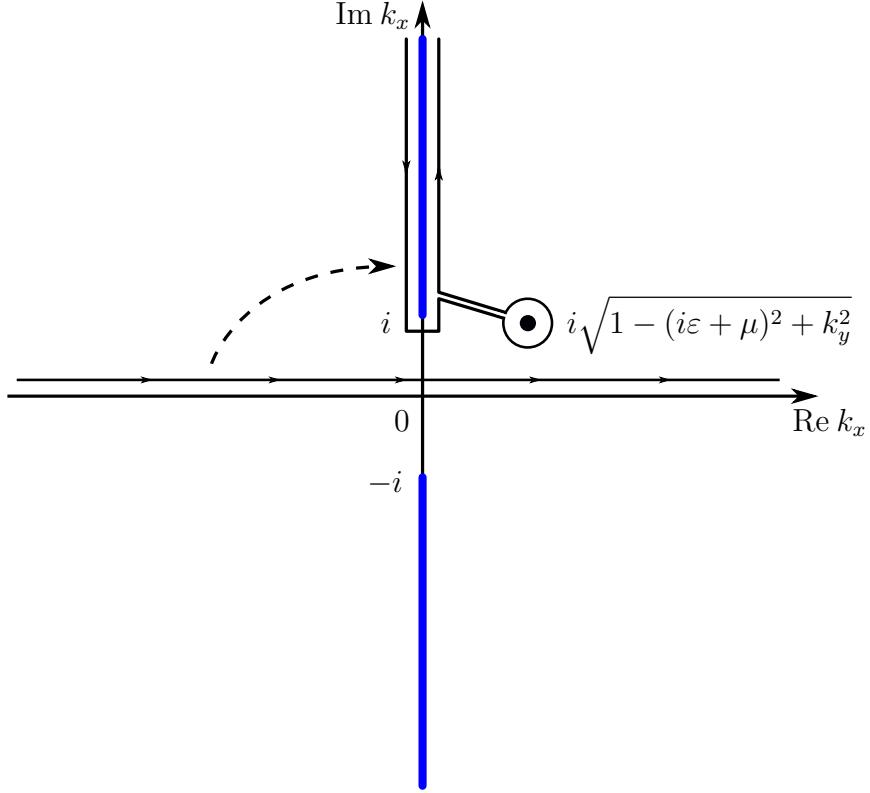


Рис. 3.2: Контур интегрирования по  $k_x$  и его деформация

Кроме того, стоит обратить внимание, что значение подынтегрального выражения совпадает в точках  $iz+0$  и  $iz-0$  для любого действительного  $z$ . Также у выражения имеется полюс в верхней полуплоскости  $k_x = i\sqrt{1 - (i\epsilon + \mu)^2 + k_y^2}$ . Тогда возможно вычислить интеграл, продеформировав контур так, как показано на рис. 3.2. Часть интеграла, которая сидит на разрезе, равна нулю. Значит, остается вычислить вычет. Это приводит к

$$G_{i,11}^{bulk}(i\epsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \int dk_y \frac{e^{ik_y Y - X\sqrt{1+(i\epsilon+\mu)^2+k_y^2}} (i\epsilon + \mu - 1)}{\sqrt{1 + (i\epsilon + \mu)^2 + k_y^2}} \quad (3.30)$$

Этот интеграл известен, его взятие кратко описано в Приложении А. В результате,

$$G_{i,11}^{bulk}(i\epsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{2\pi} K_0(\sqrt{1 - (i\epsilon + \mu)^2} R) (i\epsilon + \mu - 1) \quad (3.31)$$

Аналогично для  $G_{inv,12}^{bulk}(i\epsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$  имеем:

$$G_{i,12}^{bulk}(i\epsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -i \frac{\sqrt{1 - (i\epsilon + \mu)^2} e^{i\phi}}{2\pi} K_1(\sqrt{1 - (i\epsilon + \mu)^2} R) \quad (3.32)$$

Здесь  $\tan \phi = \frac{y-y'}{x-x'}$ . В итоге, полная инвариантная часть функции Грина имеет вид:

$$G_i^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \begin{pmatrix} \mathcal{G}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') & \hat{0} \\ \hat{0} & \mathcal{G}^*(-i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') \end{pmatrix} \quad (3.33)$$

$$\mathcal{G}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{2\pi} (K_0(\lambda R)(\sigma_z - (i\varepsilon + \mu)) - i\lambda K_1(\lambda R) [n_x \sigma_x - n_y \sigma_y]) \quad (3.34)$$

где  $\lambda = \sqrt{1 - (\mu + i\varepsilon)^2}$  и  $\mathbf{n} = \mathbf{R}/R$ .

Вычислим теперь неинвариантную относительно трансляций часть функции Грина  $G_{ni}^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ .

Также как и раньше, необходимо вычислить лишь два элемента:  $G_{ni,11}^{bulk}$  и  $G_{ni,12}^{bulk}$ . Выражение для элемента 11 имеет вид:

$$G_{ni,11}^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = - \int \int \frac{dk_x}{2\pi} \frac{dk_y}{2\pi} e^{ik_y Y} e^{ik_x |\tilde{X}|} \left( \frac{1 - (\mu + i\varepsilon) + k_x(k_x - ik_y)}{(1 + ik_x)(1 - (\mu + i\varepsilon)^2 + k_x^2 + k_y^2)} \right) \quad (3.35)$$

Интегрируя по  $k_y$  получим

$$G_{ni,11}^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{2} \int \frac{dk_x}{2\pi} \frac{e^{ik_x |\tilde{X}|} e^{-Y \sqrt{1 - (\mu + i\varepsilon)^2 + k_x^2}}}{\sqrt{1 - (\mu + i\varepsilon)^2 + k_x^2}} \times \frac{1 - (\mu + i\varepsilon) + k_x(k_x + \sqrt{1 - (\mu + i\varepsilon)^2 + k_x^2})}{1 + ik_x} \quad (3.36)$$

На этом шаге удобно переписать это выражение в виде (описание такого перехода приведено в Приложении А):

$$G_{ni,11}^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \int_0^{+\infty} dz e^{-z} (2K_0(\rho(z))(1 - \mu - i\varepsilon) + (1 - (\mu + i\varepsilon)^2)(e^{2i\phi(z)} K_2(\rho(z)) - K_0(\rho(z)))) \quad (3.37)$$

Здесь введены две функции переменной  $z$ :

$$\rho(z) = \sqrt{1 - (\mu + i\varepsilon)^2} \sqrt{(|\tilde{X}| - z)^2 + Y^2}, \quad e^{i\phi(z)} = \frac{i(|\tilde{X}| - z) + Y}{\sqrt{(|\tilde{X}| - z)^2 + Y^2}} \quad (3.38)$$

Аналогично рассмотрим  $G_{ni,12}^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ :

$$G_{ni,12}^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = - \int \int \frac{dk_x}{2\pi} \frac{dk_y}{2\pi} e^{ik_y Y} e^{ik_x |\tilde{X}|} \left( \frac{(\mu + i\varepsilon)k_x - ik_y}{(1 + ik_x)(1 - (\mu + i\varepsilon)^2 + k_x^2 + k_y^2)} \right) \quad (3.39)$$

Это выражение переписывается в виде

$$G_{ni,12}^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{\sqrt{1 - (\mu + i\varepsilon)^2}}{2\pi} \int_0^{+\infty} dz e^{-z} K_1(\rho(z)) (i(\mu + i\varepsilon) \sin \phi(z) + \cos \phi(z)) \quad (3.40)$$

Посмотрим на асимптотическое поведение этих выражений.

Вновь проведем вычисление при  $\varepsilon = 0$ , а затем выполним аналитическое продолжение

$\mu \rightarrow \mu + i\varepsilon$ .

Находить функцию Грина будем в пределе  $Y \gg \frac{1}{\sqrt{1-\mu^2}}$ . Такое приближение позволяет использовать асимптотическое выражение для функции Бесселя вне зависимости от величины  $|\tilde{X}|$ . Итак, используем тот факт, что

$$K_\nu(a) \simeq \sqrt{\frac{\pi}{2a}} e^{-a}$$

для  $a \gg 1$  и любого  $\nu$ .

При вычислении будем раскладывать  $\rho(z)$  в аргументе функции Бесселя до линейного члена. Условия применимости такого приближения в деталях рассмотрены в Приложении В.

Итак, на нулевой мацубаровской энергии ответ получается простым взятием Лапласова интеграла:

$$G_{ni,11}^{bulk}(0, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{i\tilde{n}_+}{2} \frac{1-\mu}{\sqrt{2\pi\sqrt{1-\mu^2}\tilde{R}}} \frac{e^{-\sqrt{1-\mu^2}\tilde{R}}}{1-\sqrt{1-\mu^2}\frac{|\tilde{X}|}{\tilde{R}}} \left( \frac{Y}{\tilde{R}} + i\mu \frac{|\tilde{X}|}{\tilde{R}} \right) \quad (3.41)$$

Здесь под  $\tilde{n}_+$  понимается  $\frac{\tilde{X}+iY}{\tilde{R}}$  (стоит иметь в виду, что  $\tilde{X} < 0$ ).

Аналогичным образом вычисляется  $G_{ni,12}^{bulk}(0, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ .

Введем теперь две функции

$$u(\mu) = -i\tilde{n}_+(1-\mu) \frac{\frac{Y}{\tilde{R}} + i\mu \frac{|\tilde{X}|}{\tilde{R}}}{1 - \sqrt{1-\mu^2} \frac{|\tilde{X}|}{\tilde{R}}}, \quad v(\mu) = \sqrt{1-\mu^2} \frac{\frac{Y}{\tilde{R}} + i\mu \frac{|\tilde{X}|}{\tilde{R}}}{1 - \sqrt{1-\mu^2} \frac{|\tilde{X}|}{\tilde{R}}} \quad (3.42)$$

Через них выражается вся неинвариантная часть функции Грина (после аналитического продолжения  $\mu \rightarrow \mu + i\varepsilon$ ):

$$G_{ni}^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sqrt{1-(\mu+i\varepsilon)^2}\tilde{R}}} e^{-\sqrt{1-(\mu+i\varepsilon)^2}\tilde{R}} \times \\ \times \begin{pmatrix} u(\mu+i\varepsilon) & v(\mu+i\varepsilon) & 0 & 0 \\ -v(\mu+i\varepsilon) & -u^*(-\mu+i\varepsilon) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u^*(\mu-i\varepsilon) & v^*(\mu-i\varepsilon) \\ 0 & 0 & -v^*(\mu-i\varepsilon) & -u(-\mu-i\varepsilon) \end{pmatrix} \quad (3.43)$$

Возможность аналитического продолжения в асимптотическом ответе также обсуждается в Приложении В.

### 3.4.2 Поляризационный оператор интерференционного РККИ

Итак, перейдем непосредственно к описанию того, как устроено интерференционное РККИ, т.е. вычислим в пределе больших расстояний поляризационный оператор. Функция Грина краевых состояний в предположении  $y_A > y_B$  имеет вид:

$$G_{\delta\alpha}^{edge}(i\varepsilon, \mathbf{r}_B, \mathbf{r}_A) = e^{\tilde{X}} \begin{pmatrix} -ie^{i\mu Y} \theta(\varepsilon) e^{-\varepsilon Y} (1 + \sigma_y) & \hat{0} \\ \hat{0} & ie^{-i\mu Y} \theta(-\varepsilon) e^{\varepsilon Y} (1 - \sigma_y) \end{pmatrix}_{\delta\alpha} \quad (3.44)$$

$$G_{\beta\gamma}^{edge}(i\varepsilon, \mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) = e^{\tilde{X}} \begin{pmatrix} ie^{-i\mu Y} \theta(-\varepsilon) e^{\varepsilon Y} (1 + \sigma_y) & \hat{0} \\ \hat{0} & -ie^{i\mu Y} \theta(\varepsilon) e^{-\varepsilon Y} (1 - \sigma_y) \end{pmatrix}_{\beta\gamma} \quad (3.45)$$

В поляризационном операторе мы сталкиваемся с интегралами вида

$$\int_{-\infty}^0 d\varepsilon e^{\varepsilon y} e^{-\sqrt{1-(i\varepsilon+\mu)^2}r} F(i\varepsilon + \mu) \quad (3.46)$$

где  $F(a)$  - некая гладкая функция,  $y > 0$ .

После замены  $z = \varepsilon - i\mu$  мы получаем интеграл, идущий от  $-\infty - i\mu$  до  $-i\mu$  в комплексной плоскости. Мы деформируем контур способом, изображенным на рисунке 3.3, так, чтобы он шел вдоль действительной оси  $-\infty$  до 0, а затем - от 0 до  $-i\mu$  вдоль мнимой оси.

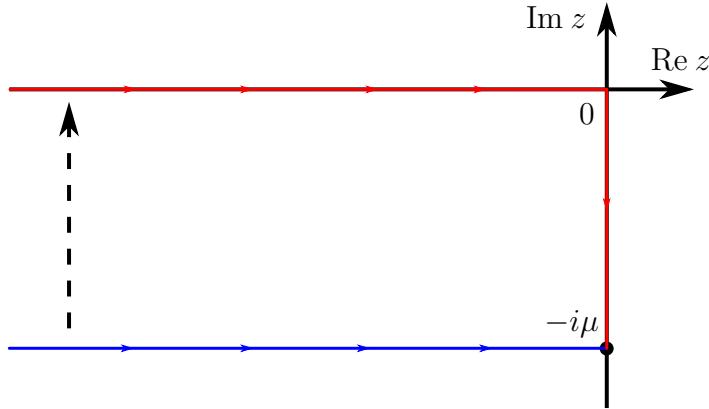


Рис. 3.3: Контур интегрирования по  $z$  и его деформация

Будем считать, что  $\mu \neq 0$  (случай  $\mu = 0$ , как и близкодействующая асимптотика при малом  $\mu$ , работающая в  $1 \ll r \ll \frac{1}{\mu^2}$ , рассмотрен в Приложении С). Тогда в асимптотике больших расстояний основной вклад происходит от части контура, идущей вдоль мнимой оси. Это связано с тем, что, как мы увидим, эта часть характеризуется пространственным затуханием  $\sim e^{-\sqrt{1-\mu^2}r}$ , в то время как интеграл вдоль действительной оси о  $\mu$  ничего не знает и затухает быстрее - как  $e^{-r}$ . Итак, необходимо вычислить

$$e^{i\mu y} \int_0^{-i\mu} dz e^{zy} e^{-\sqrt{1-(i\varepsilon+\mu)^2}r} F(iz) \quad (3.47)$$

Очередная замена  $z = -i(\mu - t)$  приводит к

$$-i \int_0^\mu dt e^{ity} e^{-\sqrt{1-(\mu-t)^2}r} F(\mu - t) \quad (3.48)$$

Раскладывая  $\sqrt{1 - (\mu - t)^2}r$  по Тейлору в  $t = 0$  мы получаем  $\sqrt{1 - \mu^2}r + \frac{\mu rt}{\sqrt{1 - \mu^2}}$ . Разложение возможно при  $r \gg \frac{1}{\mu^2 \sqrt{1 - \mu^2}}$ . Тогда интеграл приближенно равен

$$-i \frac{\sqrt{1 - \mu^2}}{r} \frac{e^{-\sqrt{1 - \mu^2}r}}{\mu - i \frac{y}{r} \sqrt{1 - \mu^2}} F(\mu) \quad (3.49)$$

Аналогичное вычисление можно провести для следующего интеграла

$$\int_0^{+\infty} d\varepsilon e^{-\varepsilon y} e^{-\sqrt{1-(i\varepsilon+\mu)^2}r} F(i\varepsilon + \mu) = i \frac{\sqrt{1 - \mu^2}}{r} \frac{e^{-\sqrt{1 - \mu^2}r}}{\mu + i \frac{y}{r} \sqrt{1 - \mu^2}} F(\mu) \quad (3.50)$$

Итак, мы готовы к вычислению  $\Pi_{\beta\gamma,\delta\alpha}^{be}$  и  $\Pi_{\beta\gamma,\delta\alpha}^{eb}$  в пределе больших расстояний. Начнем с части, в которую входит инвариантная часть функции Грина. Используя свойства, отмеченные выше, а также асимптотическую форму модифицированных функций Бесселя, сразу же получаем

$$\begin{aligned} \Pi_{\beta\gamma,\delta\alpha, i}^{be} = & \frac{1}{2} e^{\tilde{X}-\sqrt{1-\mu^2}R} \frac{(1-\mu^2)^{1/4}}{(2\pi R)^{3/2}} \times \\ & \times \begin{pmatrix} (\sigma_z - \mu) - i\sqrt{1-\mu^2}[n_x\sigma_x - n_y\sigma_y] & \hat{0} \\ \hat{0} & (\sigma_z - \mu) + i\sqrt{1-\mu^2}[n_x\sigma_x + n_y\sigma_y] \end{pmatrix}_{\beta\gamma} \times \\ & \times \begin{pmatrix} (1+\sigma_y)\frac{e^{i\mu Y}}{\mu+i\frac{Y}{R}\sqrt{1-\mu^2}} & \hat{0} \\ \hat{0} & (1-\sigma_y)\frac{e^{-i\mu Y}}{\mu-i\frac{Y}{R}\sqrt{1-\mu^2}} \end{pmatrix}_{\delta\alpha} \end{aligned} \quad (3.51)$$

Аналогично получается

$$\begin{aligned} \Pi_{\beta\gamma,\delta\alpha, i}^{eb} = & \frac{1}{2} e^{\tilde{X}-\sqrt{1-\mu^2}R} \frac{(1-\mu^2)^{1/4}}{(2\pi R)^{3/2}} \times \\ & \times \begin{pmatrix} (\sigma_z - \mu) + i\sqrt{1-\mu^2}[n_x\sigma_x - n_y\sigma_y] & \hat{0} \\ \hat{0} & (\sigma_z - \mu) - i\sqrt{1-\mu^2}[n_x\sigma_x + n_y\sigma_y] \end{pmatrix}_{\delta\alpha} \times \\ & \times \begin{pmatrix} (1+\sigma_y)\frac{e^{-i\mu Y}}{\mu-i\frac{Y}{R}\sqrt{1-\mu^2}} & \hat{0} \\ \hat{0} & (1-\sigma_y)\frac{e^{i\mu Y}}{\mu+i\frac{Y}{R}\sqrt{1-\mu^2}} \end{pmatrix}_{\beta\gamma} \end{aligned} \quad (3.52)$$

Та же процедура для неинвариантной части функции Грина приводит в пределе  $\tilde{R} \gg \frac{1}{\mu^2\sqrt{1-\mu^2}}$  к:

$$\begin{aligned} \Pi_{\beta\gamma,\delta\alpha, ni}^{be} = & -\frac{1}{2} \frac{(1-\mu^2)^{1/4}}{(2\pi\tilde{R})^{3/2}} e^{\tilde{X}-\sqrt{1-\mu^2}\tilde{R}} \begin{pmatrix} u(\mu) & v(\mu) & 0 & 0 \\ -v(\mu) & -u^*(-\mu) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u^*(\mu) & v^*(\mu) \\ 0 & 0 & -v^*(\mu) & -u(-\mu) \end{pmatrix}_{\beta\gamma} \times \\ & \times \begin{pmatrix} (1+\sigma_y)\frac{e^{i\mu Y}}{\mu+i\frac{Y}{R}\sqrt{1-\mu^2}} & \hat{0} \\ \hat{0} & (1-\sigma_y)\frac{e^{-i\mu Y}}{\mu-i\frac{Y}{R}\sqrt{1-\mu^2}} \end{pmatrix}_{\delta\alpha} \end{aligned} \quad (3.53)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{\beta\gamma,\delta\alpha, ni}^{eb} = & -\frac{1}{2} \frac{(1-\mu^2)^{1/4}}{(2\pi\tilde{R})^{3/2}} e^{\tilde{X}-\sqrt{1-\mu^2}\tilde{R}} \begin{pmatrix} u^*(\mu) & -v^*(\mu) & 0 & 0 \\ v^*(\mu) & -u(-\mu) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u(\mu) & -v(\mu) \\ 0 & 0 & v(\mu) & -u^*(-\mu) \end{pmatrix}_{\delta\alpha} \times \\ & \times \begin{pmatrix} (1+\sigma_y)\frac{e^{-i\mu Y}}{\mu-i\frac{Y}{R}\sqrt{1-\mu^2}} & \hat{0} \\ \hat{0} & (1-\sigma_y)\frac{e^{i\mu Y}}{\mu+i\frac{Y}{R}\sqrt{1-\mu^2}} \end{pmatrix}_{\beta\gamma} \end{aligned} \quad (3.54)$$

Перейдем к анализу этого ответа.

### 3.5 Анализ ответа для интерференционного РККИ

Начнем этот раздел с рассмотрения предельного случая.

Во-первых, пусть одна из примесей расположена в точности на краю топологического

изолятора. Такой случай немедленно приводит к  $\tilde{R} = R$ . Во-вторых, пусть  $\mu = 1 - \delta\mu$ , где  $\delta\mu \ll 1$ . Асимптотика в этом случае начинает работать на очень больших расстояниях, но ответ заметно упрощается.

В главном порядке по  $\mu$  в инвариантной части функции Грина остается только два элемента на диагонали. В поляризационном операторе соответствующие элементы ведут себя как  $\delta\mu^{1/4}$ . Остальные члены на диагонали дают вклад порядка  $\delta\mu^{5/4}$ , а вне диагонали -  $\delta\mu^{3/4}$ . Стоит также заметить, что неинвариантная часть функции Грина в таком пределе совпадает с инвариантной. Значит, приближенно выполнено

$$\Pi_{\beta\gamma,\delta\alpha}^{\text{interference}} \simeq 2\Pi_{\beta\gamma,\delta\alpha,i}^{be} + 2\Pi_{\beta\gamma,\delta\alpha,i}^{eb} \quad (3.55)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{\beta\gamma,\delta\alpha,i}^{be} &= e^{\tilde{X}-\sqrt{2\delta\mu}R} \frac{\delta\mu^{1/4}}{2^{3/4}(2\pi R)^{3/2}} \begin{pmatrix} (\sigma_z - 1) & \hat{0} \\ \hat{0} & (\sigma_z - 1) \end{pmatrix}_{\beta\gamma} \begin{pmatrix} (1 + \sigma_y)e^{iY} & \hat{0} \\ \hat{0} & (1 - \sigma_y)e^{-iY} \end{pmatrix}_{\delta\alpha} \\ \Pi_{\beta\gamma,\delta\alpha,i}^{eb} &= e^{\tilde{X}-\sqrt{2\delta\mu}R} \frac{\delta\mu^{1/4}}{2^{3/4}(2\pi R)^{3/2}} \begin{pmatrix} (\sigma_z - 1) & \hat{0} \\ \hat{0} & (\sigma_z - 1) \end{pmatrix}_{\delta\alpha} \begin{pmatrix} (1 + \sigma_y)e^{-iY} & \hat{0} \\ \hat{0} & (1 - \sigma_y)e^{iY} \end{pmatrix}_{\beta\gamma} \end{aligned}$$

В этом случае для РККИ взаимодействия получаем

$$\begin{aligned} H_{\text{exchange}}^{\text{interference}} &= -e^{\tilde{X}-\sqrt{2\delta\mu}R} \frac{2^{13/4}\delta\mu^{1/4}}{(2\pi R)^{3/2}} \cos Y \times \\ &\times (J_2^A J_2^B S_z^A S_z^B + J_0^A J_0^B (\mathbf{S}^A \cdot \mathbf{S}^B) + J_0^A J_2^B S_x^A S_z^B + J_0^B J_2^A S_x^B S_z^A) \end{aligned} \quad (3.56)$$

Этот ответ работает в пределе  $R \gg 1/\delta\mu^{1/2}$ .

Стоит отметить несколько особенностей полученного результата - они непосредственно транслируются на случай произвольного  $\mu$ .

Во-первых, в нем присутствует спадание вида  $e^{\tilde{X}}$ , а также осцилляции  $\sim e^{i\mu Y}$ . Оба этих обстоятельства происходят из того, как устроена волновая функция краевого состояния. Во-вторых, имеется затухание вида  $\exp[-\sqrt{1-\mu^2}R]$ . Оно явно зависит от положения химического потенциала, а значит, длину интерференционного взаимодействия можно контролировать, прикладывая к образцу напряжение. В-третьих, в спиновой структуре взаимодействия имеются как слагаемые, действующие только в плоскости ( $xx$  и  $yy$ ), так и слагаемые, действующие вне этой плоскости ( $zz$  и  $xz$ ). Это интересно по той причине, что РККИ взаимодействие за счет краевых состояний включает только взаимодействие в плоскости. Значит, интерференционное РККИ может оказаться основным в смысле взаимодействия  $zz$  компонент. В частности, это может быть важно, если в системе имеется сильная анизотропия типа легкая ось  $\sim -D_z S_z^2$  (см. [13]), которая сводит все взаимодействие магнитных примесей к взаимодействию их  $z$ -компонент.

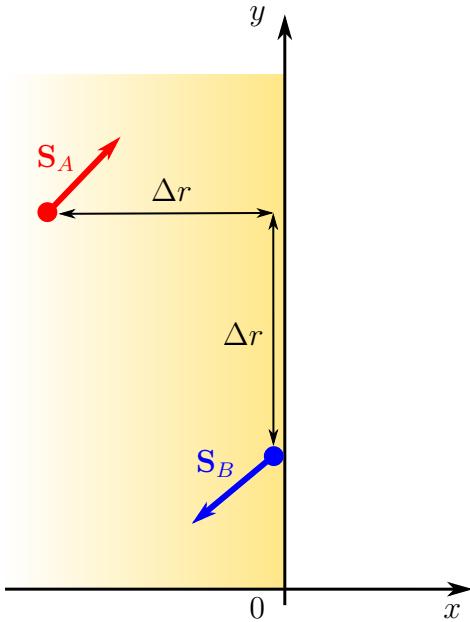


Рис. 3.4: Одна из конфигураций, в которых основной обмен между примесями происходит за счет интерференционного РККИ: одна примесь находится глубоко в толще, а другая - на краю.

Перейдем теперь к сравнению различных вкладов в РККИ взаимодействие. Для начала, рассмотрим простой пример, иллюстрирующий, что в некоторых случаях, интерференционное РККИ может оказываться намного значительнее РККИ за счет краевых и объемных состояний. Допустим, что одна из примесей расположена в точности на краю, а другая - в объеме, причем расстояние между ними вдоль оси  $0x$  совпадает с расстоянием вдоль оси  $0y$  и равно  $\Delta r$ . Такая конфигурация изображена на 3.4. В случае, если  $\mu = 1 - \delta\mu$ ,  $\delta\mu \ll 1$ , то  $H_{\text{exchange}}^{\text{bb}} \sim e^{-2\sqrt{2}\Delta r}$ ,  $H_{\text{exchange}}^{\text{ee}} \sim e^{-2\Delta r}$ , а  $H_{\text{exchange}}^{\text{interference}} \sim e^{-\Delta r(1+\sqrt{4\delta\mu})}$ . Видно, что последний тип взаимодействия затухает медленнее, чем два других. Естественно, такое соотношение между различными типами взаимодействия не носит общего характера. Интерференционное и краевое РККИ исчезает для магнитных примесей, расположенных вдали от края, поэтому в толще образца на первом месте стоит РККИ за счет объемных состояний.

В случае, когда одна из примесей расположена около края, выигрывающее взаимодействие определяется положением второй примеси. Если вторая примесь также расположена вблизи края, то основным обменом является РККИ за счет краевых состояний. Это выполнено даже при  $\mu$  близком к 1 - действительно, обмен за счет краевых состояний (3.10) спадает как  $\frac{1}{Y}$ , в то время как интерференционный РККИ спадает как  $(\frac{1}{Y})^{3/2}$ . Однако, интерференционный обмен становится основным по мере удаления второй примеси вглубь, так как краевое РККИ спадает как  $e^{2\tilde{X}}$ , а интерференционное - как  $e^{\tilde{X}}$ .

# Глава 4

## Заключение

В данной работе было исследовано косвенное обменное взаимодействие (РККИ взаимодействие) магнитных примесей, расположенных вблизи края двумерного топологического изолятора. При этом, топологический изолятор рассматривался в линеаризованной модели (2.1), а магнитная примесь - в модели, справедливой для квантовой ямы CdTe/HgTe/CdTe (см. [13]).

Для вычисления РККИ взаимодействия была найдена функция Грина задачи, при этом она была разделена на две части: функцию Грина объемных состояний (2.17) и функцию Грина краевых состояний (2.16). Это привело к тому, что в РККИ взаимодействии обнаружилось три различных по природе вклада: РККИ за счет краевых состояний (3.10), РККИ за счет объемных состояний (3.10) и интерференционное РККИ (3.5).

Первые два вклада рассматривались ранее в работах [14] и [13] соответственно. В данной же дипломной работе было указано на то, как изменяется РККИ за счет объемных состояний из-за присутствия края, а также рассмотрен случай конечных температур для РККИ за счет краевых состояний.

Изучение третьего вклада - РККИ за счет интерференции - является основным результатом данного исследования. Было установлено, этот тип взаимодействия:

- осциллирует по мере разнесения примесей вдоль края;
- затухает с характерной длиной, зависящей от положения химического потенциала краевого состояния.

Было произведено сравнение величины различных вкладов. Выяснилось, что интерференционный косвенный обмен во многих случаях оказывается основным типом взаимодействия.

В заключение стоит заметить, что, помимо двумерных топологических изоляторов, есть и другие системы, к которым можно применить описание, аналогичное приведенному в данной работе. В частности, оно позволяет ответить на вопрос о том, как модифицируется обменное взаимодействие вблизи доменной стенки на поверхности трехмерного топологического изолятора с ферромагнитно упорядоченными примесями в нем.

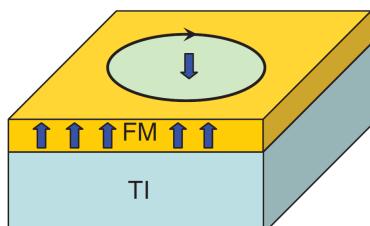


Рис. 4.1: Система, описанная выше: в 3D топологическом изоляторе имеется ферромагнитный слой на поверхности, а в нем имеется домен. Рисунок из [1].

# Глава 5

## Приложения

### 5.1 Приложение А

Рассматривается интеграл вида

$$G_{i,11}^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \int dk_y \frac{e^{ik_y Y - X \sqrt{1+(i\varepsilon+\mu)^2+k_y^2}}(i\varepsilon + \mu - 1)}{\sqrt{1 + (i\varepsilon + \mu)^2 + k_y^2}} \quad (5.1)$$

Вычислим его при  $\varepsilon = 0$ , а затем сделаем аналитическое продолжение в область мнимого химического потенциала. Для начала, переопределим  $k_y \rightarrow \sqrt{1-\mu^2}k_y$ ,  $\eta = Y\sqrt{1-\mu^2}$ , а также  $\xi = X\sqrt{1-\mu^2}$ . В итоге, получим интеграл

$$G_{i,11}^{bulk}(0, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \int \frac{dk_y}{\sqrt{1+k_y^2}} e^{ik_y \eta - \xi \sqrt{1+k_y^2}} (\mu - 1) = -\frac{1}{4\pi} \int dt e^{-\rho \cosh(t-i\phi)} (\mu - 1) \quad (5.2)$$

где  $\rho = \sqrt{\xi^2 + \eta^2}$  и  $\phi = \arctan \frac{\eta}{\xi}$ . Для любого действительного  $a$

$$\int dt e^{-\rho \cosh(t+a)} = 2K_0(\rho) \quad (5.3)$$

Аналитическое продолжение приводит к

$$G_{i,11}^{bulk}(0, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{2\pi} K_0(\rho)(\mu - 1) \quad (5.4)$$

Тогда

$$G_{i,11}^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{2\pi} K_0(\sqrt{1-(i\varepsilon+\mu)^2}R)(i\varepsilon + \mu - 1) \quad (5.5)$$

Аналогичным образом вычисляется  $G_{inv,12}^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ . Интеграл имеет похожий вид:

$$G_{i,12}^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int \frac{dk_x dk_y}{2(2\pi)^2} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}(k_x + ik_y)}{\sqrt{1+k^2}} \left( \frac{1}{i\varepsilon + \mu - \sqrt{1+k^2}} - \frac{1}{i\varepsilon + \mu + \sqrt{1+k^2}} \right) \quad (5.6)$$

Рассматривая предел  $\varepsilon = 0$ , вычисляя вычет и делая замену переменных, получаем:

$$G_{i,12}^{bulk}(0, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -i \frac{\sqrt{1-\mu^2}}{4\pi} \int dt e^{-\rho \cosh(t-i\phi)} (\cosh t + \sinh t) \quad (5.7)$$

где  $\xi = X\sqrt{1-\mu^2}$ ,  $\eta = Y\sqrt{1-\mu^2}$ ,  $\rho = \sqrt{\xi^2 + \eta^2}$  и  $\phi = \arctan \frac{\eta}{\xi}$ . Рассматривая

$$\int dt e^{-\rho \cosh(t-a)} (\cosh t + \sinh t)$$

с действительным  $a$ , приходим к

$$\int dt e^{-\rho \cosh t} \cosh t (\cosh a + \sinh a) = 2K_1(\rho)(\cosh a + \sinh a) \quad (5.8)$$

Продолжая на мнимую ось  $a = i\phi$  и  $\varepsilon \neq 0$  получаем

$$G_{i, 12}^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -i \frac{\sqrt{1 - (i\varepsilon + \mu)^2} e^{i\phi}}{2\pi} K_1(\sqrt{1 - (i\varepsilon + \mu)^2} R) \quad (5.9)$$

Перейдем теперь к  $G_{ni, 11}^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ :

$$G_{ni, 11}^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{2} \int \frac{dk_x}{2\pi} \frac{e^{ik_x|\tilde{X}|} e^{-Y\sqrt{1-(\mu+i\varepsilon)^2+k_x^2}}}{\sqrt{1 - (\mu + i\varepsilon)^2 + k_x^2}} \times \\ \times \frac{1 - (\mu + i\varepsilon) + k_x(k_x + \sqrt{1 - (\mu + i\varepsilon)^2 + k_x^2})}{1 + ik_x} \quad (5.10)$$

Рассмотрим это выражение на нулевом  $\varepsilon$ .

Поднимая  $1 + ik_x$  в числителе, делая замену  $k_x = \sinh t$ , а также вводя  $\rho(z)$  и  $\phi(z)$  (см. (3.38)), получаем:

$$G_{ni, 11}^{bulk}(0, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \int_0^{+\infty} dz e^{-z} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-\rho(z) \cosh(t - i\phi(z))} \times \\ \times (1 - \mu + \sinh t (\sinh t + \cosh t) (1 - \mu^2)) \quad (5.11)$$

Делая сдвиг (как в описанных выше вычислениях), приходим к ответу:

$$G_{ni, 11}^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \int_0^{+\infty} dz e^{-z} (2K_0(\rho(z))(1 - \mu - i\varepsilon) + \\ + (1 - (\mu + i\varepsilon)^2)(e^{2i\phi(z)} K_2(\rho(z)) - K_0(\rho(z)))) \quad (5.12)$$

Аналогично получается:

$$G_{ni, 12}^{bulk}(i\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{\sqrt{1 - (\mu + i\varepsilon)^2}}{2\pi} \int_0^{+\infty} dz K_1(\rho(z)) (i(\mu + i\varepsilon) \sin \phi(z) + \cos \phi(z)) \quad (5.13)$$

## 5.2 Приложение В

В этом приложении речь идет об интегралах типа (взятых на нулевой мацубаровской энергии)

$$\int_0^{+\infty} dz e^{-z} K_\nu(\rho(z)) \quad (5.14)$$

где  $\rho(z)$  определено в (3.38). Это интегралы, возникающие в неинвариантной части функции Грина объемных состояний. Описанный в данной работе асимптотический ответ для нее получен разложением  $\rho(z)$  до первого порядка по  $z$ . Поэтому необходимо выяснить, когда такое разложение законно. Для этого нужно оценить масштабы по переменной  $z$ , на которых интегралы такого типа сходятся. Рассмотрим, для начала,

случай  $Y \gg |\tilde{X}|$ . Масштаб сходимости в этом случае определяется  $e^{-z}$ , т.е. по порядку величины равен  $\Delta z \sim 1$ . Разложение до первого порядка, в таком случае, возможно: достаточное условие -  $Y \gg 1/\sqrt{1-\mu^2}$ , которое мы заведомо считаем выполненным.

Пусть теперь  $|\tilde{X}| \sim Y$ . Тогда  $\rho(z) \simeq \sqrt{1-\mu^2} \left( \tilde{R} - \frac{|\tilde{X}|z}{\tilde{R}} \right)$  влияет на сходимость. Она происходит на

$$\Delta z \sim \frac{1}{1 - \sqrt{1 - \mu^2} \frac{|\tilde{X}|}{\tilde{R}}}.$$

Сравнивая первый и второй порядок, приходим к условию, описывающему возможность линейного приближения

$$\tilde{R} \gg \frac{Y^2 \sqrt{1 - \mu^2}}{(\tilde{R} - \sqrt{1 - \mu^2} |\tilde{X}|)^2}$$

Рассмотрим, наконец, случай  $|\tilde{X}| \gg Y$ . Обратим внимание, что  $\sqrt{(|\tilde{X}| - z)^2 + Y^2}$  при  $Y = 0$  представляет собой функцию с изломом на  $z = |\tilde{X}|$ . Если  $Y$  конечен, то излома больше нет - он размывается на величину  $\sim Y \ll |\tilde{X}|$ . Значит, раскладываться до первого порядка по  $z$  можно лишь в случае, когда масштаб сходимости, обеспечиваемый этим разложением, оказывается намного меньше  $|\tilde{X}|$ . То есть,

$$\frac{\tilde{R}}{\tilde{R} - \sqrt{1 - \mu^2} |\tilde{X}|} \ll |\tilde{X}|.$$

С учетом  $|\tilde{X}| \gg Y$  это соотношение приводит к условию вида

$$\tilde{R} \gg \frac{1}{\frac{Y^2}{|\tilde{X}|^2} + \left(1 - \sqrt{1 - \mu^2}\right)}.$$

При нулевом химическом потенциале оно переходит в  $\tilde{R} \gg \frac{|\tilde{X}|^2}{Y^2} \gg 1$  - то есть, асимптотика начинает работать на очень больших расстояниях.

Обсудим теперь кратко возможность аналитического продолжения в асимптотике неинвариантной части функции Грина. Дело в том, что при переходе к аналитическому продолжению точность, с которой работает полученный для нее ответ может упасть, так как условия его применимости при этом изменяются. Например, рассмотрим  $\mu = 0$  и  $\varepsilon = \pm Y/|\tilde{X}|$ . Масштаб сходимости интеграла по  $z$ , описанный в этом приложении  $\Delta z \sim \frac{1}{1 - \sqrt{1 + \varepsilon^2} \frac{|\tilde{X}|}{\tilde{R}}}$  формально становится бесконечным, но это просто говорит о том, что линейного приближения под аргументом функции Бесселя здесь не достаточно. Эта проблема, однако, не существенна, ведь предэкспонента функции Грина в конечном результате берется на нулевой мацубаровской энергии.

### 5.3 Приложение С

Будем считать, что  $Y > 0$ , и рассмотрим случай  $\mu = 0$ . Полученный ответ также отвечает случаю  $\mu \ll 1$ ,  $1 \ll R \ll \frac{1}{\mu^2}$ . В этом пределе ответ для части поляризационного оператора, связанной с инвариантной относительно трансляций частью функции Грина, выражается в терминах следующего интеграла

$$I(a, b) = \int_0^{+\infty} d\varepsilon K_0(\sqrt{1 + \varepsilon^2} a) e^{-b\varepsilon}, \quad (5.15)$$

определенной при  $b > 0$ , и имеет вид:

$$\begin{aligned} \Pi_{i,\beta\gamma,\delta\alpha}^{be} = & \frac{-ie^{\tilde{X}+i\mu Y}}{(2\pi)^2} M_{\delta\alpha}^{\uparrow} \begin{pmatrix} \sigma_z + i\partial_Y + i(n_x\sigma_x - n_y\sigma_y)\partial_R & \hat{0} \\ \hat{0} & \sigma_z + i\partial_Y - i(n_x\sigma_x + n_y\sigma_y)\partial_R \end{pmatrix}_{\beta\gamma} I(R, Y) + \\ & + \frac{ie^{\tilde{X}-i\mu Y}}{(2\pi)^2} M_{\delta\alpha}^{\downarrow} \begin{pmatrix} \sigma_z - i\partial_Y + i(n_x\sigma_x - n_y\sigma_y)\partial_R & \hat{0} \\ \hat{0} & \sigma_z - i\partial_Y - i(n_x\sigma_x + n_y\sigma_y)\partial_R \end{pmatrix}_{\beta\gamma} I(R, Y) \end{aligned} \quad (5.16)$$

Матрицы  $M^{\uparrow/\downarrow}$  введены в (3.9).

Аналогично для  $\Pi_{i,\beta\gamma,\delta\alpha}^{eb}$  получается:

$$\begin{aligned} \Pi_{i,\beta\gamma,\delta\alpha}^{eb} = & \frac{ie^{\tilde{X}-i\mu Y}}{(2\pi)^2} M_{\beta\gamma}^{\uparrow} \begin{pmatrix} \sigma_z - i\partial_Y - i(n_x\sigma_x - n_y\sigma_y)\partial_R & \hat{0} \\ \hat{0} & \sigma_z - i\partial_Y + i(n_x\sigma_x + n_y\sigma_y)\partial_R \end{pmatrix}_{\delta\alpha} I(R, Y) + \\ & + \frac{-ie^{\tilde{X}+i\mu Y}}{(2\pi)^2} M_{\beta\gamma}^{\downarrow} \begin{pmatrix} \sigma_z + i\partial_Y - i(n_x\sigma_x - n_y\sigma_y)\partial_R & \hat{0} \\ \hat{0} & \sigma_z + i\partial_Y + i(n_x\sigma_x + n_y\sigma_y)\partial_R \end{pmatrix}_{\delta\alpha} I(R, Y) \end{aligned} \quad (5.17)$$

Приближенное выражение для функции  $I(R, Y)$  в пределе  $R \gg 1$  дается формулой

$$I(R, Y) = e^{-R+\frac{Y^2}{2R}} \sqrt{\frac{\pi}{2R}} \left( 1 - \text{Erf} \left[ \frac{Y}{\sqrt{2R}} \right] \right) \quad (5.18)$$

Часть поляризационного оператора, связанная с неинвариантной частью функции Грина, также выписывает через функцию  $I$ , однако, ответ здесь имеет несколько более сложную структуру. Введем  $s = \sqrt{(|\tilde{X}| - z)^2 + Y^2}$ , а также функции

$$J_{11}(\phi, s, Y) = (2(1 + i\partial_Y) + e^{2i\phi}(2\partial_s^2 - 1) - (1 + \partial_Y^2)) I(s, Y) \quad (5.19)$$

$$J_{12}(\phi, s, Y) = (-2\partial_s(\sin \phi \partial_Y + \cos \phi)) I(s, Y) \quad (5.20)$$

Тогда получаем

$$\begin{aligned} \Pi_{ni,\beta\gamma,\delta\alpha}^{be} = & \frac{ie^{\tilde{X}+i\mu Y}}{2(2\pi)^2} M_{\delta\alpha}^{\uparrow} \int_0^{+\infty} dz e^{-z} \times \\ & \times \begin{pmatrix} J_{11}(\phi, s, Y) & J_{12}(\phi, s, Y) & 0 & 0 \\ J_{12}(\pi - \phi, s, Y) & -J_{11}^*(\phi, s, Y) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & J_{11}(-\phi, s, Y) & J_{12}(\phi, s, Y) \\ 0 & 0 & J_{12}(\pi - \phi, s, Y) & -J_{11}^*(-\phi, s, Y) \end{pmatrix}_{\beta\gamma} + \\ & + \frac{-ie^{\tilde{X}-i\mu Y}}{2(2\pi)^2} M_{\delta\alpha}^{\downarrow} \int_0^{+\infty} dz e^{-z} \begin{pmatrix} J_{11}^*(-\phi, s, Y) & J_{12}(-\phi, s, Y) & 0 & 0 \\ J_{12}(\pi + \phi, s, Y) & -J_{11}(-\phi, s, Y) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & J_{11}^*(\phi, s, Y) & J_{12}(-\phi, s, Y) \\ 0 & 0 & J_{12}(\pi + \phi, s, Y) & -J_{11}(\phi, s, Y) \end{pmatrix}_{\beta\gamma} \end{aligned} \quad (5.21)$$

и аналогично

$$\begin{aligned}
\Pi_{ni, \beta\gamma, \delta\alpha}^{eb} &= \frac{ie^{\tilde{X}+i\mu Y}}{2(2\pi)^2} M_{\beta\gamma}^\downarrow \int_0^{+\infty} dz e^{-z} \times \\
&\times \begin{pmatrix} J_{11}(-\phi, s, Y) & J_{12}(\pi - \phi, s, Y) & 0 & 0 \\ J_{12}(\phi, s, Y) & -J_{11}^*(-\phi, s, Y) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & J_{11}(\phi, s, Y) & J_{12}(\pi - \phi, s, Y) \\ 0 & 0 & J_{12}(\phi, s, Y) & -J_{11}^*(\phi, s, Y) \end{pmatrix}_{\delta\alpha} + \\
&+ \frac{-ie^{\tilde{X}-i\mu Y}}{2(2\pi)^2} M_{\beta\gamma}^\uparrow \int_0^{+\infty} dz e^{-z} \begin{pmatrix} J_{11}^*(\phi, s, Y) & J_{12}(\pi + \phi, s, Y) & 0 & 0 \\ J_{12}(-\phi, s, Y) & -J_{11}(\phi, s, Y) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & J_{11}^*(-\phi, s, Y) & J_{12}(\pi + \phi, s, Y) \\ 0 & 0 & J_{12}(-\phi, s, Y) & -J_{11}(-\phi, s, Y) \end{pmatrix}_{\delta\alpha}
\end{aligned} \tag{5.22}$$

# Список литературы

- [1] X.-L. Qi, S.-C. Zhang, “Topological insulators and superconductors”, *Science* **83**, 1057 (2011)
- [2] C. L. Kane and E. J. Mele, “ $Z_2$  topological order and the quantum spin Hall effect”, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 146802 (2005)
- [3] B.A. Bernevig, T.L. Hughes, S.-C. Zhang, “Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells”, *Science* **314**, 1757 (2006)
- [4] M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi, S.-C. Zhang, “Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells”, *Science* **318**, 766 (2007)
- [5] J. Maciejko, Ch. Liu, Y. Oreg, X.-L. Qi, C. Wu, and S.- C. Zhang, “Kondo effect in the helical edge liquid of the quantum spin Hall state”, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 256803 (2009)
- [6] Y. Tanaka, A. Furusaki, and K. A. Matveev, “Conductance of a helical edge liquid coupled to a magnetic impurity”, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 236402 (2011)
- [7] B. L. Altshuler, I. L. Aleiner, and V. I. Yudson, “Localization at the Edge of a 2D Topological Insulator by Kondo Impurities with Random Anisotropies”, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 086401 (2013)
- [8] M. A. Ruderman and C. Kittel, “Indirect exchange coupling of nuclear magnetic moments by conduction electrons”, *Phys. Rev.* **96**, 99 (1954)
- [9] T. Kasuya, “A theory of metallic ferro- and antiferromagnetism on Zeners model”, *Prog. Theor. Phys.* **16**, 45 (1956)
- [10] K. Yosida, “Magnetic properties of Cu-Mn alloys”, *Phys. Rev.* **106**, 893 (1957)
- [11] N. Bloembergen and T. J. Rowland, “Nuclear Spin Exchange in Solids:  $Tl_{203}$  and  $Tl_{205}$  Magnetic Resonance in Thallium and Thallic Oxide”, *Phys. Rev.* **97**, 1679 (1955)
- [12] A. A. Abrikosov, “Spin glasses with short range interaction”, *Adv. Phys.* **29**, 869 (1980)
- [13] Курилович П.Д., “Косвенное обменное взаимодействие в квантовой яме CdTe/HgTe/CdTe”, выпускная квалификационная работа бакалавра, (2016)
- [14] Y.-W. Lee, Y.-L. Lee, “Electrical control and interaction effects of the RKKY interaction in helical liquids”, *Phys. Rev. B* **91**, 214431 (2015)
- [15] M. König, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, T. Hughes, C.-X. Liu, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, “The quantum spin Hall effect: Theory and experiment”, *J. Phys. Soc. Jpn* **77**, 031007 (2008)

- [16] G. Dresselhaus, “Spin-Orbit Coupling Effects in Zinc Blende Structures”, Phys. Rev. **100**, 580 (1955)
- [17] D.G. Rothe, R.W. Reinthalera, C.-X. Liu<sup>1</sup>, L.W. Molenkamp, S.-C. Zhang, E.M. Hankiewicz, “Fingerprint of different spin-orbit terms for spin transport in HgTe quantum wells”, New J. Phys. **10**, 065012 (2010)
- [18] B.A. Volkov, O.A. Pankratov, “Two-dimensional Massless Electrons in an Inversed Contact”, JETP Letters **42** 4, 178 (1985)
- [19] D. K. Efimkin, V. Galitski, “Self-consistent theory of ferromagnetism on the surface of a topological insulator”, Phys. Rev. B **89**, 115431 (2014)
- [20] А.А. Абрикосов, Л.П. Горьков, И.Е. Дзялошинский “Методы квантовой теории поля в статистической физике”, изд. “Добросвет”, издание второе, (1998)