

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт
радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова
Российской академии наук

На правах рукописи

Загороднев Игорь Витальевич

**Краевые электронные возбуждения в графене и
2D топологическом изоляторе на основе
квантовых ям Cd(Hg)Te**

01.04.10 – Физика полупроводников

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Научный руководитель

д. ф.-м. н.

Волков Владимир Александрович

Москва – 2015

Содержание

Введение	4
Обзор литературы	11
1. Теория эффективной массы и проблема граничных условий.	12
2. Краевые состояния в графене.	18
3. 2D топологические изоляторы.	27
4. 1D плазменные колебания	30
Глава 1. Краевые (таммовские) состояния в графене	34
1.1. Граничное условие для огибающих функций	34
1.2. Электронный спектр полуплоскости и полосы	41
1.3. Электронный спектр полуплоскости и полосы в магнитном поле	46
1.4. Электронный спектр квантовой точки и антиточки без магнитного поля	56
1.5. Электронный спектр квантовой антиточки в магнитном поле	58
1.6. Сечение рассеяния электронов на графеновой антиточке	77
Глава 2. Краевые возбуждения в 2D топологическом изоляторе на основе Cd(Hg)Te	82
2.1. Граничное условие	82
2.2. Электронный спектр полубесконечного образца	84
2.3. Плазменные колебания краевых дираковских фермионов в 2D системе массивных дираковских фермионов.	93
2.4. Плазменные колебания краевых дираковских фермионов в 2D топологическом изоляторе	99
Заключение	103
Список сокращений и условных обозначений	105

Литература	106
Приложение А. Граничное условие для нейтрино Вейля	122
Приложение Б. Оператор инверсии времени в графене	125

Введение

Актуальность темы исследования. Прогресс в современной электронике, физике и технике полупроводников во многом связан с 2D наноструктурами и их миниатюризацией. При малых размерах возрастает роль краевых эффектов. Так, на краю 2D системы могут существовать краевые состояния, обусловленные как примесями или дефектами, так и резким обрывом кристаллического потенциала на атомарно чистой трансляционно-инвариантной границе. В последнем случае краевые состояния иногда называют таммовскими. Краевые состояния могут приводить к качественно новым физическим эффектам.

В последние годы активно развиваются исследования 2D систем, в которых электроны описываются уравнением Дирака или его модификацией. Так, с 2004 г. графен привлекает к себе внимание своим уникальным «ультрарелятивистским» спектром, за который электроны в графене стали называть безмассовыми дираковскими фермионами [1]. В 2010 г. важность исследований этого материала была подтверждена Нобелевским комитетом. На возможность существования краевых (таммовских) состояний в графене было указано еще в 1996 г. в работе [2]. Несмотря на множество научных работ, опубликованных с тех пор, до сих пор нет единого представления о параметрах, в первую очередь, энергетическом спектре, этих состояний в графене [3]. Нахождение энергетических параметров таммовских состояний все еще является актуальной задачей.

Помимо графена, несколько лет назад появился целый класс узкощелевых полупроводниковых материалов, в которых существование краевых (или поверхностных в 3D случае) таммовских состояний в запрещенной зоне следует из топологических соображений [4, 5]. Такие материалы стали называть топологическими изоляторами (ТИ). В них образуется проводящий канал на поверхности изолятора. Существование такого 1D канала краевых электронов было обнаружено экспериментально в транспортных измерениях квантовых ям

Hg(Cd)Te [6]. Энергетический спектр краевых состояний и здесь требует еще уточнения.

Одним из наиболее ярких проявлений краевых эффектов в 2D системах является квантовый эффект Холла, в котором магнитные краевые состояния связаны с квантованием холловской проводимости. Таммовские состояния, существующие и без магнитного поля, могут существенно изменить электронный спектр в магнитном поле и, как следствие, повлиять на проводимость в магнитном поле.

Другим фундаментальным физическим эффектом, на который могут влиять таммовские состояния, является эффект Ааронова-Бома, заключающийся в осцилляциях магнитосопротивления образца в форме кольца с периодом равным кванту магнитного потока hc/e . В теории этого эффекта обычно считается, что магнитное поле пронизывает только полость в образце, но не проникает в сам образец. Недавно появились эксперименты по измерению магнитосопротивления в графеноподобных структурах с некольцевой геометрией, в которых также наблюдается эффект Ааронова-Бома [7]. Объяснение этих экспериментов является актуальной задачей.

Цели и задачи диссертационной работы: построение модели края при эффективном описании графена и 2D ТИ на основе квантовых ям Cd(Hg)Te на языке огибающих волновых функций; анализ краевых состояний и эффектов, в которых они проявляются.

Для достижения поставленных целей были решены следующие задачи:

1. Вывод граничного условия (ГУ) для эффективного уравнения типа Дирака, описывающего графен или 2D ТИ.
2. Вычисление спектров таммовских состояний для образца в форме полуплоскости, а в графене также и в наиболее важных геометриях: полоса, квантовая точка и антиточка (бесконечный лист с круглым отверстием).
3. Анализ эффектов, в которых могут проявляться таммовские состояния:

проводимость, плазменные колебания.

Научная новизна и практическая значимость работы. В диссертации предложено новое теоретическое описание края графена и 2D ТИ на основе квантовых ям $\text{Cd}(\text{Hg})\text{Te}$, развита теория краевых электронных возбуждений в этих материалах, которая успешно применена для объяснения транспортных экспериментов в наноперфорированном графене.

Положения, выносимые на защиту:

1. Предложено однопараметрическое граничное условие на эффективную двухкомпонентную волновую функцию, описывающее край графена в пренебрежении междолинным рассеянием и удовлетворяющее общим физическим требованиям - самосопряженности и инвариантности по отношению к инверсии времени. Оно позволяет аналитически получить электронные спектры графеновых наноструктур в форме полуплоскости, полосы, квантовой точки и антиточки.
2. В пренебрежении междолинным рассеянием одночастичный энергетический спектр длинноволновых краевых (таммовских) состояний на трансляционно-инвариантном линейном краю графена, полученный с использованием указанного выше граничного условия, представляет собой лучи, начинающиеся в центре проекции долин на направление края. В магнитном поле в одной из долин происходит антикроссинг объемных уровней Ландау с такими краевыми состояниями.
3. При наличии на антиточке локализованных квазистационарных (краевых) состояний низкотемпературная проводимость графеновых структур с такими антиточками имеет осцилляционную зависимость от положения уровня Ферми, обусловленную резонансным рассеянием на уровнях краевых состояний. При изменении магнитного поля, перпендикулярного антиточке, уровни краевых состояний в квазиклассическом приближении

почти периодически пересекают уровень Ферми, с периодом, определяемым прохождением кванта магнитного потока через антидот.

4. Предложено общее граничное условие для 2D топологического изолятора на основе квантовых ям Cd(Hg)Te, удовлетворяющее общим физическим требованиям. Оно содержит 6 феноменологических параметров, два из которых зануляются при учете зеркальной симметрии края. При некоторых значениях граничных параметров краевые состояния могут иметь существенно нелинейную дисперсию или вовсе отсутствовать вблизи центра проективной зоны Бриллюэна.

Степень достоверности и апробация результатов. Достоверность представленных в диссертации результатов подтверждается тем, что при расчётах использовались проверенные методы теоретической физики, воспроизводящие результаты в различных подходах; совпадением предсказанных эффектов с экспериментальными измерениями. Полученные теоретические результаты признаны научной общественностью при обсуждениях на российских и международных научных конференциях и семинарах, а также подтверждены положительными рецензиями опубликованных статей в научных журналах.

Результаты исследований, вошедших в диссертацию, докладывались на International Symposium on Graphene Devices: Technology, Physics, and Modeling (Aizu Wakamatsu, Japan, November 17-19, 2008); 51-й научной конференции МФТИ «Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук» (Москва-Долгопрудный, 27-30.11.2008); VII Зимней школе по теоретической физике «Введение в теорию наноструктур» (Московская обл., г. Дубна, 25.01-05.02.2009 г.); 16th International Conference on Electron Dynamics in Semiconductors, Optoelectronics and Nanostructures (France, Montpellier, August 24-28, 2009); 17th, 18th и 22th International Symposium «Nanostructures: Physics and Technology» (Беларусь, г. Минск, 22-26.06.2009, г. Санкт-Петербург, 21-26.06.2010 и г. Санкт-Петербург, 23-27.06.2014); Международных зим-

них школах по физике полупроводников (С.-Петербург-Зеленогорск, 27.02 - 02.03.2009 и 25-28.02.2011); IX, X, XI и XII Российской конференции по физике полупроводников (Новосибирск – Томск, 28.09–3.10.2009, Н. Новгород, 19-23.09.2011, г. Санкт-Петербург 16-20.09.2013, Ершово 21-25.09.2015); XIII и XV Школах молодых ученых «Актуальные проблемы физики» (Звенигород - Москва, 14-19 .11.2010 и г. Москва, 16-20.11.2014 г.); XIV, XV и XIX Международном симпозиуме «Нанозифика и нанозфотоника» (Н. Новгород, 15-19.03.2010, 14-18.03.2011 и 10-14.03.2015); Уральской международной зимней школе по физике полупроводников (Екатеринбург-Новоуральск, 15-20.02.2010 г.); IX и XI конференции «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления» (Московская обл., г. Троицк, 09.06.2011 и 6.06.2013); 9th Advanced Research Workshop Fundamentals of Electronic Nanosystems (г. Санкт-Петербург, 21-27.06.2014), а также на научных семинарах теоретического отдела ФИАН (5.04.2011 и 9.04.2013), семинаре сектора квантовой мезоскопии ИТФ им. Л.Д. Ландау (12.12.2014 и 17.04.2015) и др.

Публикации. Материалы диссертации опубликованы в 29 печатных работах, из них 7 статей в российских журналах, входящих в Перечень изданий, рекомендованных ВАК Минобразования и науки РФ [8–14], 2 статьи в зарубежных рецензируемых журналах, включенных в систему Web of Science [15, 16], 20 публикаций в сборниках трудов и тезисов конференций [17–36], а также в одной электронной публикации [37].

Личный вклад автора. Автор принимал участие в постановке задач и обсуждении результатов. Все расчеты проводились автором лично. Написание статей проводилось совместно с соавторами, причем вклад диссертанта в подготовке теоретических публикаций был определяющим.

Структура диссертации. Диссертация состоит из введения, обзора литературы, 2-х глав, заключения, библиографии и 2-х приложений. Работа содержит 125 страниц, 26 рисунков и список литературы из 138 источников.

В **Обзоре литературы** обсуждается проблема граничных условий для многозонной системы уравнений эффективной массы. Сделан вывод о том, что общий вид граничных условий можно получить из общих физических соображений, таких как условие эрмитовости гамильтониана в ограниченной области и симметрия по отношению к инверсии времени. Эти идеи положены в основу вывода граничных условий для эффективного гамильтониана графена (первая глава) и 2D топологического изолятора на основе квантовых ям Cd(Hg)Te (вторая глава). Во втором пункте Обзора рассматриваются теоретические и экспериментальные работы по таммовским состояниям (ТС) в графене. Сделан вывод о том, что несмотря на довольно богатую историю исследований ТС в графене, экспериментальные результаты пока неоднозначны и не могут служить доказательством той или иной теории ТС. Это оправдывает выбранное в диссертации феноменологическое описание края графена. В третьем пункте обзора содержится введение в топологические изоляторы (ТИ), в нем также приводится гамильтониан, который будет использован во второй главе. Делается вывод о том, что топологические соображения позволяют предсказать наличие краевых состояний в щели, но не могут предсказать их электронный спектр, на который неизбежно должны влиять конкретные условия на поверхности. Наконец, в последнем пункте обзора коротко обсуждаются возможные подходы к описанию 1D плазменных колебаний в твердом теле, а также последние экспериментальные достижения по измерению спектра плазменных колебаний. Такие плазменные колебания могут возникать на краю 2D топологического изолятора и будут определяться параметрами краевых состояний.

Первая глава состоит из 6 разделов и посвящена проблеме ГУ для эффективного гамильтониана графена (раздел 1.1), анализу электронных спектров графеновых наноструктур: полуплоскости, полосы, квантовой точки и антиточки в отсутствие (разделы 1.2 и 1.4) и при наличии магнитного поля, перпендикулярного плоскости структуры (разделы 1.3 и 1.5), а также сечению рассеяния электронов на антиточке без магнитного поля (раздел 1.6).

Вторая глава состоит из 4-х разделов и посвящена 2D топологическому изолятору. Выводятся возможные ГУ, налагаемые на эффективную волновую функцию, описывающую 2D топологический изолятор на основе квантовых ям Cd(Hg)Te (раздел 2.1), анализируется спектр краевых состояний для полубесконечного образца (раздел 2.2) и выводится закон дисперсии длинноволновых плазменных колебаний краевых электронов, существующих на краю 2D системы (разделы 2.3 и 2.4).

В **заключении** сформулированы основные результаты работы.

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

Обзор литературы

Физика поверхностных состояний (ПС) от оригинальной работы И.Е. Тамма [38] до 1970 года достаточно подробно изложена в обзорах [39, 40]. Некоторые сведения о дальнейшем развитии исследований ПС в 3D материалах можно найти в книге [41] и в специальном выпуске журнала *Surface Science* Vol. 299–300, изданном также в виде книги [42]. В общих словах ситуацию можно охарактеризовать следующим образом. Несмотря на огромный прогресс в изучении таммовских состояний (т.е. ПС на идеальной трансляционно инвариантной поверхности) как с теоретической, так и с экспериментальной сторон, до сих пор не существует единого теоретического базиса, позволяющего уверенно описывать и предсказывать существование и свойства ПС в различных материалах. В первую очередь это, видимо, связано с достаточно сложным строением поверхности, на которой происходит релаксация, реконструкция, осаждение различных примесей, нарушение трансляционной инвариантности вдоль поверхности из-за неоднородностей и шероховатостей. По-видимому, с этим же связано отсутствие или, во всяком случае, сильное подавление проявлений таммовских состояний в экспериментах. Иная ситуация может сложиться в открытых недавно 2D материалах, таких как графен и топологические изоляторы. В последних существование краевые состояния в запрещенной зоне "объемного" материала защищено топологическими соображениями и поэтому можно ожидать проявлений ПС в них.

В общем случае поверхность должна характеризоваться большим количеством параметров, не связанных с объемными свойствами материала, что вызывает существенные вычислительные трудности. В сложившейся ситуации плодотворными могут быть простые феноменологические теории, основанные на общих физических требованиях. Введению в одну из таких теорий, которая служит базисом данной диссертации, посвящен первый пункт этого обзора. В следующих двух пунктах обсуждаются открытые не так давно 2D материалы

- графен и топологические изоляторы, кратко описываются их объемные свойства, но основное внимание уделено краевым состояниям (КС) в этих материалах и их возможным экспериментальным проявлениям. В последнем разделе представлены основные сведения по одномерным плазменным колебаниям.

1. Теория эффективной массы и проблема граничных условий.

В физике полупроводников большое значение имеет метод эффективной массы (или огибающих функций) Кона-Латтинджера [43, 44]. При расчете зонной структуры неограниченного материала в отсутствие внешних полей его также называют **кп** теорией (возмущений). Суть этого метода состоит в том, что полная волновая функция электрона в кристалле представляется в виде произведения быстро осциллирующих (на атомных масштабах) блоховских функций $u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$ на плавные огибающие $F_n(\mathbf{r})$:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_n F_n(\mathbf{r})u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}). \quad (1)$$

Блоховские функции выбирают в экстремальной точке \mathbf{k}_0 какой-либо зоны (обычно валентной или проводимости). Индекс зоны n в общем случае включает спиновое квантовое число. Суммирование должно идти по всему бесконечному набору зон, однако, в нем, как правило, оставляют только несколько наиболее важных зон. Электронный спектр и огибающие находятся из следующей системы уравнений:

$$\sum_{n'} \left\{ \left[\epsilon_{n\mathbf{k}_0} + \frac{\hbar^2}{2m_0} (k^2 - k_0^2) \right] \delta_{nn'} + \frac{\hbar}{m_0} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0, \mathbf{p}_{nn'}) \right\} F_{n'}(\mathbf{r}) = EF_n(\mathbf{r}), \quad (2)$$

m_0 — масса свободного электрона, $\mathbf{p}_{nn'} = \langle u_{n\mathbf{k}_0} | \mathbf{p} | u_{n'\mathbf{k}_0} \rangle$ — матричный элемент оператора импульса. Это уравнение можно рассматриваться как эффективное уравнение Шредингера с матричным гамильтонианом размером $n \times n$, действу-

ющим на эффективную волновую функцию, составленную из n огибающих. Плавные внешние поля могут быть включены в эффективный гамильтониан.

Система (2) обычно используется для описания неограниченных кристаллов. При наличии границы возникает проблема ее описания в этом методе. Возмущение кристаллического потенциала на границе должно быть резким, что трудно учесть в теории эффективной массы, но если мы интересуемся, например, ПС с достаточно большой длиной локализации (заметно больше, чем масштаб резкого изменения потенциала на границе), то для описания таких ПС достаточно дополнить систему (2) граничными условиями (ГУ) на поверхности S . Обсуждению таких ГУ, как с микроскопической, так и с феноменологической точек зрения, посвящены работы [45, 46]. В них показано, что ГУ в принципе можно найти используя детальную микроскопическую структуру границы. Однако, конкретные вычисления, ввиду сложности задачи, удалось провести только в модели прямоугольного скачка кристаллического потенциала на границе. При это оказалось, что простейшее ГУ $F_n(\mathbf{r}_S) = 0$ в однозонном приближении (когда в сумме (1) оставляют только один член) является лишь одними из возможных и не описывает поверхностные состояния. Более того, в многозонном приближении такие нулевые ГУ могут привести к переопределенной системе и, в конечном счете, только к тривиальным (нулевым) решениям (волновым функциям), что будет показано ниже. Кроме того, в этих работах было показано, что микроскопическое ГУ можно вывести из общих физических требований (эрмитовости и Т-инвариантности), при этом микроскопические параметры границы собираются в феноменологических параметрах ГУ.

Продemonстрируем в простейшем однозонном случае вывод феноменологического ГУ. Эффективный однозонный оператор гамильтониана

$$H_1 = \frac{p^2}{2m^*}, \quad (3)$$

где m^* — эффективная масса, \mathbf{p} — оператор импульса. Гамильтониан должен быть эрмитовым, т.е. для любых двух функций $\psi(\mathbf{r})$, $\varphi(\mathbf{r})$ должно выполняться

следующее условие:

$$\langle \psi | H_1 | \varphi \rangle = \langle \varphi | H_1 | \psi \rangle^* . \quad (4)$$

На математическом языке нужно построить самосопряженное расширение гамильтониана H_1 в ограниченной области. Интегрируя по частям левую часть равенства (4) можно получить следующее ограничение на волновые функции:

$$\left(1 + R \frac{\partial}{\partial \mathbf{n}} \right) \psi(\mathbf{r}_S) = 0, \quad (5)$$

здесь \mathbf{n} — вектор нормали (условимся здесь и в дальнейшем выбирать внешнюю нормаль), r_S — координаты радиус-вектора на поверхности, R — вещественный феноменологический параметр, характеризующий свойства поверхности, принимающий значения от $-\infty$ до ∞ и имеющий размерность длины. Он не зависит от энергии, что накладывает ограничения на применимость этой теории — скачок потенциала на границе должен быть достаточно большим по сравнению с описываемыми интервалами энергий. Напомним, что выше было еще требование о том, чтобы скачок потенциала был резким по сравнению характерными длинами волновых функций. В общем случае R может зависеть от координаты r_S , однако, в случае чистой кристаллографически ориентированной поверхности его следует считать константой, по крайней мере, для поверхностей с не слишком большими индексами Миллера. Значение этой константы может быть определено, например, из эксперимента, или из более точных микроскопических расчетов. Обратим внимание, что из полученного ГУ, естественно, следует отсутствие нормального тока на границе.

Для целей диссертационной работы важен другой пример, также обсуждавшийся в работе [45] — полупроводник, зонная структура которого может быть описана уравнением Дирака:

$$c^* \begin{pmatrix} mc^* & \sigma \mathbf{p} \\ \sigma \mathbf{p} & -mc^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_c \\ F_v \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} F_c \\ F_v \end{pmatrix}, \quad (6)$$

где F_v , F_c — спиноры, соответствующие валентной зоне и зоне проводимости, $2m(c^*)^2 = E_g$ — ширина запрещенной зоны, σ — вектор матриц Паули, раз-

мерность которого зависит от размерности рассматриваемой системы. Здесь и в дальнейшем матрицы Паули подразумеваются в следующем стандартном представлении:

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (7)$$

То, что уравнение Дирака возникает в двухзонном приближении с учетом спин-орбитальной связи в теории эффективной массы Кона-Латтинжера было отмечено еще Л.В. Келдышем в [47]. Так, в $Pb_{1-x}Sn_xTe$ подобная ситуация реализуется вблизи L-точки, расположенной в центре шестиугольной грани первой зоны Бриллюэна [48], а также (в грубом приближении) во многих халькогенидах свинца и висмута (см. также раздел 3).

Феноменологическое ГУ для уравнения Дирака, выведенное только из эрмитовости, содержит довольно много параметров. Чтобы сузить класс возможных ГУ используют симметрию по отношению к инверсии времени (Т-инверсия). Действительно, уравнение Дирака в неограниченном пространстве обладает такой инверсией и в отсутствие магнитных полей нет оснований полагать, что граница кристалла нарушит ее. Используя вышесказанное, можно получить ГУ для уравнения Дирака:

$$(F_v - ia_0\sigma\mathbf{n}F_c)|_S = 0, \quad (8)$$

где $a_0 \in (-\infty, \infty)$ — единственный (!) неизвестный действительный безразмерный параметр. ГУ представляет собой два линейных уравнения, связывающих компоненты спиноров на границе.

Приведем здесь спектр ПС на плоской границе, полученный решением уравнения Дирака с ГУ (8) на полупространстве $z > 0$ [49]. ПС существуют для любых a_0 . Их волновая функция $\propto \exp[ik_{||}y - \kappa_{\tau}(k_{||})x]$ экспоненциально спадает от границы, а спектр имеет линейный вид:

$$E_{\tau}(k_{||}) = m(c^*)^2 \frac{1 - a_0^2}{1 + a_0^2} + \tau\hbar v c^* k_{||} \frac{2a_0}{1 + a_0^2}, \quad (9)$$

Условие их существования:

$$\kappa_\tau(k_{||}) = \tau k_{||} \frac{1 - a_0^2}{1 + a_0^2} - \frac{mc^*}{\hbar} \frac{2a_0}{1 + a_0^2} > 0. \quad (10)$$

Здесь $k_{||}$ — волновой вектор вдоль поверхности, κ_τ — обратная глубина локализации ПС, $\tau = \pm 1$ — собственное значение следующего оператора, похожего на оператор спиральности:

$$\begin{pmatrix} \sigma \mathbf{n} \times \mathbf{p} & 0 \\ 0 & -\sigma \mathbf{n} \times \mathbf{p} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_c \\ F_v \end{pmatrix} = \tau |\mathbf{n} \times \mathbf{p}| \begin{pmatrix} F_c \\ F_v \end{pmatrix}. \quad (11)$$

τ нумерует две ветви ПС. При $a_0 < 0$ ПС существуют в запрещенной зоне (предполагается, что $m > 0$) и имеют спектр безмассовых «ультрарелятивистских» частиц. Электроны, имеющие подобный спектр, в последнее время в физике полупроводников часто называют дираковскими.

В физике полупроводников часто возникает и другое представление уравнения Дирака:

$$\begin{pmatrix} \sigma \mathbf{p} & m \\ m & -\sigma \mathbf{p} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \end{pmatrix}. \quad (12)$$

Переход от одного представления к другому осуществляется унитарным преобразованием:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sigma_0 & \sigma_0 \\ \sigma_0 & -\sigma_0 \end{pmatrix}. \quad (13)$$

ГУ, эквивалентное ГУ (8), для этого представления имеет вид:

$$(F_1 + e^{i\gamma_0 \sigma \mathbf{n}} F_2)|_S = 0. \quad (14)$$

В него входит феноменологический параметр $\gamma_0 \in [0, 2\pi)$, однозначно связанный со старым параметром a_0 следующим образом: $\sin \gamma_0 = \frac{2a_0}{1+a_0^2}$, $\cos \gamma_0 = \frac{1-a_0^2}{1+a_0^2}$ (тогда $a_0 = \infty$ при $\gamma_0 = \pi$).

В конце этой части рассмотрим еще один важный для целей диссертации пример, в котором возникают ПС на плавном (на атомном масштабе) контакте

двух родственных материалов с взаимно инвертированными зонами [50, 51]. В качестве примера, авторы этих работ приводили узкощелевой полупроводник $Pb_{1-x}Sn_xTe$. Предполагалось, что ширина запрещенной зоны 2Δ и работа выхода линейно зависят от химического состава (x). Пусть состав плавно меняется вдоль оси z , так что в точке $z = 0$ происходит инверсия зон, т.е.

$$\Delta(z) = \Delta_0 f(z), \quad \varphi(z) = \varphi_0 f(z), \quad f(0) = 0, \quad (15)$$

где φ описывает изменение работы выхода при изменении состава. Конкретный вид $f(z)$ не имеет значения. Такую плавно-неоднородную (по оси z) систему можно описать уравнением типа Дирака с координатно-зависящей массой (для простоты мы рассмотрим изотропный случай):

$$\begin{pmatrix} \Delta(z) & c^* \sigma \mathbf{p} \\ c^* \sigma \mathbf{p} & -\Delta(z) \end{pmatrix} F = (E - \varphi(z)) F. \quad (16)$$

Можно показать, что если $|\Delta_0| > |\varphi_0|$, то вблизи точки инверсии зон существуют интерфейсные состояния с безмассовым линейным спектром:

$$\epsilon_{\pm}(\mathbf{p}_{\parallel}) = \pm c^* p_{\parallel} \sqrt{1 - \frac{\varphi_0^2}{\Delta_0^2}}, \quad (17)$$

где $\mathbf{p}_{\parallel} = (p_x, p_y)$ — 2D импульс вдоль контакта. Подобные солитонные решения в теории поля были получены также в работе [52].

На обсуждаемой гетерогранице могут существовать и другие состояния, но эти уникальны своим бесщелевым ультрарелятивистским спектром, а также тем, что для их существования нужно только чтобы функция $f(z)$ меняла знак. Это один из фактов, лежащих в основе концепции топологических изоляторов.

Интересно, рассмотреть случай $f(+\infty) = 1$, $f(z < 0) = -\infty$, что можно трактовать как модель полубесконечного кристалла, расположенного при $z > 0$ и имеющего запрещенную зону Δ_0 , а интерфейсные безмассовые дираковские состояния — как поверхностные состояния, т.к. их волновая функция в этом случае будет целиком расположена при $z > 0$ и затухать вглубь образца. Можно связать параметры Δ_0 и φ_0 с феноменологическим граничным параметром a_0

[53]:

$$a_0 = \text{sign}(\Delta_0) \sqrt{\frac{\Delta_0 - \varphi_0}{\Delta_0 + \varphi_0}}. \quad (18)$$

Величина a_0 определяется "несимметричностью" перехода относительно $E = 0$. При $a_0 < 0$, величина $\Delta_0 < 0$ (и попрежнему $|\Delta_0| > |\varphi_0|$), что отвечает инвертированным зонам (при $z > 0$) и наличию ПС в обоих моделях. Этот факт удивителен тем, что модели принципиально поразному описывают границу. Модель Б. Волкова и О. Панкратова [50] предполагает плавность потенциала, в то время как модель В. Волкова и Т. Пинскер [49] его резкость. На реальной же границе кристалла происходит большой по величине изгиб зон, так что двухзонное приближение, которое существенным образом используется в модели Б. Волкова и О. Панкратова, вообще говоря, не применимо.

Итак, был продемонстрирован простой метод получения граничного условия, описывающего поверхность кристалла без детальной микроскопической конкретизации последней. Именно этот метод будет положен в основу описания края в недавно открытых 2D материалах с дираковские фермионами (графен и топологические изоляторы), описанию которых посвящены следующие разделы.

2. Краевые состояния в графене.

Графен - монослой атомов углерода, который можно представлять как одну атомную плоскость графита, рис. 1а. Он имеет двумерную гексагональную кристаллическую решетку с двумя одинаковыми атомами в элементарной ячейке. Иногда удобно обозначать атомы в элементарной ячейке буквами A и B и представлять атомную структуру графена как составленную из двух эквивалентных треугольных подрешеток атомов типа A и B . Расстояние между ближайшими атомами графена 0,14 нм, постоянная решетки - $d \approx 0,25$ нм. Обратная решетка графена тоже гексагональная, рис. 1б. Первая зона Бриллюэна,

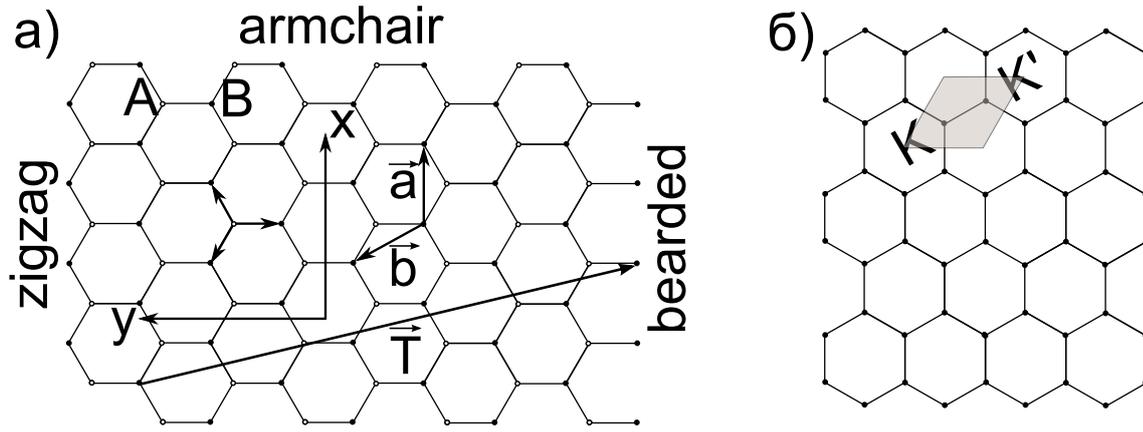


Рис. 1. Прямая (а) и обратная (б) решетка графена.

определенная стандартным образом (как элементарная ячейка Вигнера-Зейтца в обратной решетке), имеет вид гексагона. В качестве альтернативы иногда удобно выбирать первую зону Бриллюэна в виде ромба, что показано на рис. 1б серым цветом.

Электроны в графене имеют бесщелевой и линейный по 2D импульсу энергетический спектр [1], причем валентная зона и зона проводимости касаются в двух неэквивалентных точках K и K' , расположенных в углах стандартной (шестиугольной) первой зоны Бриллюэна. Эти точки иногда называют дираковскими или K -точками. Зонная структура вырождена по спину. После получения графена в лаборатории [54] интерес к этому материалу был связан именно с таким необычным «ультрарелятивистским» спектром.

Без учета спина в рамках теории эффективной массы огибающие волновые функции электронов $(F_1, F_2, F_3, F_4)^T$ в каждой долине описываются двухкомпонентным уравнением Вейля [55] с гамильтонианом, применяемым для описания нейтрино:

$$H_{gr} = c^* \begin{pmatrix} \sigma \mathbf{p} & 0 \\ 0 & -\sigma \mathbf{p} \end{pmatrix} \quad (19)$$

$c^* \approx 10^6$ м/с — аналог скорости света в графене. Это уравнение может быть получено преобразованием четырехкомпонентного уравнения Дирака при занулении массы (т.е. ширины запрещенной зоны). Поэтому часто говорят, что электроны в графене подчиняются уравнению Дирака (или Вейля-Дирака, или

просто Вейля) и имеют безмассовый дираковский спектр в виде пары конусов.

В модели сильной связи [56, 57] огибающие можно отождествить с волновыми функциями, локализованными на подрешетках A и B , и в низкоэнергетическом приближении имеющими характерный импульс вблизи K или K' , так что $F_{1,3}$ локализованы, скажем, на подрешетке A , а $F_{2,4}$ — на подрешетке B .

Проективная зонная структура.

Прежде чем переходить к вопросу о краевых состояниях в графене разберемся с проективной зонной структурой графена. Выберем оси координат так, как показано на рис. 1а. Пусть вектора трансляции кристаллической решетки графена $\mathbf{a} = d(1, 0)$, $\mathbf{b} = d(1/2, \sqrt{3}/2)$, а кристаллографическое направление границы задано вектором

$$\mathbf{T} = n\mathbf{a} + m\mathbf{b} = d \left(n - \frac{m}{2}, \frac{\sqrt{3}m}{2} \right), \quad (20)$$

где n, m — некоторые целые числа. Заметим, что если вектор нормали к границе $\mathbf{n} = (\cos \alpha, \sin \alpha)$, то $\alpha = \arctan(\sqrt{3}m/(2n - m))$. Обратные вектора кристаллической решетки задаются векторами

$$\mathbf{G} = k\mathbf{a}^* + l\mathbf{b}^* = \frac{2\pi}{d} \left(k, k + \frac{l}{2} \right), \quad (21)$$

где $\mathbf{a}^* = 2\pi/d \times (1, 1/\sqrt{3})$, $\mathbf{b}^* = 2\pi/d \times (0, 2/\sqrt{3})$, а k и l — любые целые числа. Выберем центр одной из долин K за начало отсчета в обратной решетке. Тогда все возможные долины K' можно найти по векторам $\mathbf{G}' = k\mathbf{a}^* + l\mathbf{b}^* - \tau_1 = 2\pi/d(k + 2/3, (k + 2l)/\sqrt{3})$. Нетрудно получить выражение для проекции векторов \mathbf{G} на направление границы \mathbf{T} :

$$G_T = \frac{T_y G_y + T_x G_x}{\sqrt{T_x^2 + T_y^2}} = \frac{2\pi}{d\sqrt{n^2 - nm + m^2}} (ml + nk). \quad (22)$$

Вторая долина при этом описывается векторами:

$$G'_T = G_T + \frac{2\pi}{d\sqrt{n^2 - nm + m^2}} \frac{2n - m}{3}. \quad (23)$$

Откуда следует, что размер 1D зоны Бриллюэна равен $2\pi/(d\sqrt{n^2 - nm + m^2})$. Как обычно, в общем случае ее размер не совпадает с размером проекции "объемной" 2D зоны Бриллюэна на границу. В зависимости от остатка деления $2n - m$ на 3 возможны три случая расположения долин в 1D зоне Бриллюэна, два из которых эквивалентны: 1) долины совпадают 2) долины разнесены на $1/3$ зоны Бриллюэна 3) долины разнесены на $2/3$ зоны Бриллюэна (перевыбором зоны Бриллюэна этот случай сводится ко второму). Например, граница типа

1) armchair: $n=1, m=2$, $G_T = G'_T = 2\pi/(d\sqrt{3})$, т.е. долины совпадают.

2) zigzag: $n=1, m=0$, $G_T = 2\pi k/d$, $G'_T = G_T + 4\pi/(3d)$, т.е. долины разнесены на $1/3$ 1D зоны Бриллюэна. Теперь, понимая как устроена проективная 1D зона Бриллюэна, перейдем к обзору работ, посвященных краевым состояниям в графене.

Теоретические работы по краевым состояниям в графене.

КС в графене впервые, видимо, были рассмотрены в [2, 58]. В этих работах использовалась модель сильной связи (МСС) или, по другому, линейная комбинация атомных орбиталей, в приближении ближайших соседей. Приближение ближайших соседей, часто достаточного для описания объемной зонной структуры, может быть недостаточным для удовлетворительного описания КС. Кроме того, свободные связи атомов углерода на границе не учитывались (считалось, что на все краевые атомы углерода садится атом водорода), не учитывалась релаксация (изменение параметров решетки у границы) и реконструкция (изменение кристаллической структуры) края. Было введено два типа края, ставших в дальнейшем каноническими: 1) «зигзаг» (zigzag) и 2) «кресло» (armchair), рис. 1а. Для полубесконечного образца графена с краем типа зигзаг зона КС представляет собой пару горизонтальных лучей, выходящих из центров долин, рис. 2в. Для образца с краем типа кресло КС отсутствуют, рис. 2а. В работе также сделан вывод о том, что для края с произвольным кристаллографическим направлением наличие трех и более идущих

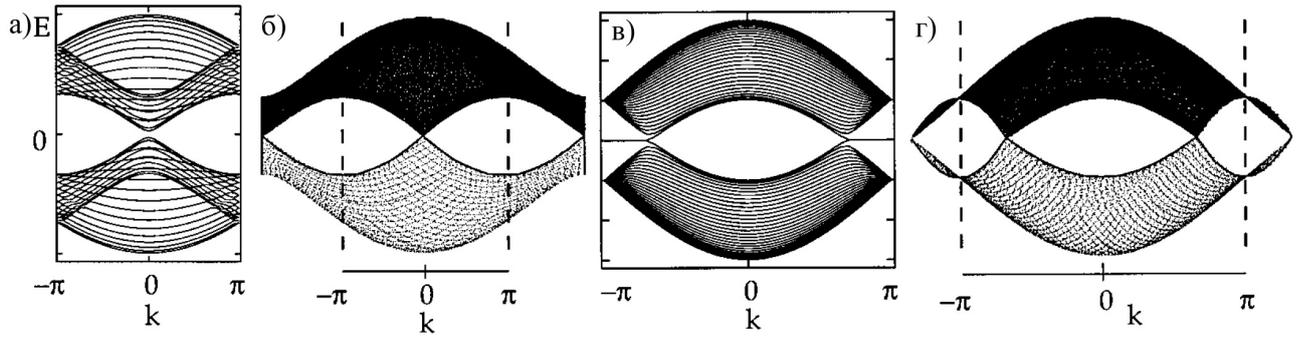


Рис. 2. Электронный спектр нанополосы графена с краями типа кресло (а) и зигзаг (в) и проективная зонная структура для края типа кресло (б) и зигзаг (г) из работы [2].

подряд «ячеек» зигзага достаточно для возникновения КС имеющих энергию вблизи дираковской точки.

В работе [59], написанной по материалам диссертации [60], в том же приближении рассмотрена полоса графена с краем типа «бухта» (cove), который получается из зигзага удалением через одного крайних атомов, и «частокол» (bearded или, как иногда его еще называют, Klein edge), рис. 1а. Хотя такие структуры вряд ли имеют отношение к реальной границе, с теоретической точки зрения они интересны тем, что КС для края типа бухта такие же, как и для зигзага, а для частоккола КС меняют область своего существования по k , оставаясь бездисперсионными.

Приближение следующих за ближайшими соседями МСС для края зигзаг рассмотрено, например, в работе [61], рис. 3, а для частоккола в работе [62]. КС приобрели дисперсию пропорциональную отношению интегралов перекрытия между ближайших соседями, t , и следующими за ближайшими соседями, t' .

В работе [64, 65] в приближении ближайших соседей, а в работе [63] еще и в приближении следующих за ближайшими соседями МСС рассмотрены края различного типа (зигзаг, кресло, частоккол) и учтена релаксация, которая моделировалась изменением интегралов перекрытия соседних атомов вблизи границы. Результаты интересны тем, что даже для края типа кресло могут появиться дисперсионные КС, которые по-прежнему выходят из центров долин, рис. 4.

Обсудим теперь так называемые первопринципные расчеты. В приближе-

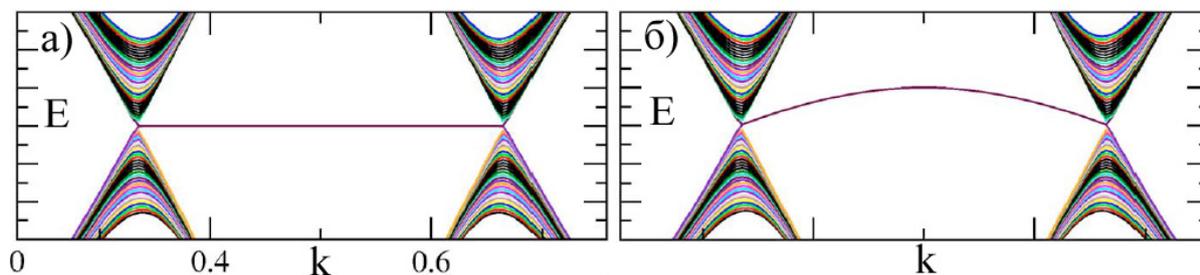


Рис. 3. Энергетический спектр для графеновой нанополосы с краями типа зигзаг (а) при учете только ближайших соседей модели сильной связи, (б) при учете следующих за ближайшими. Из работы [61].

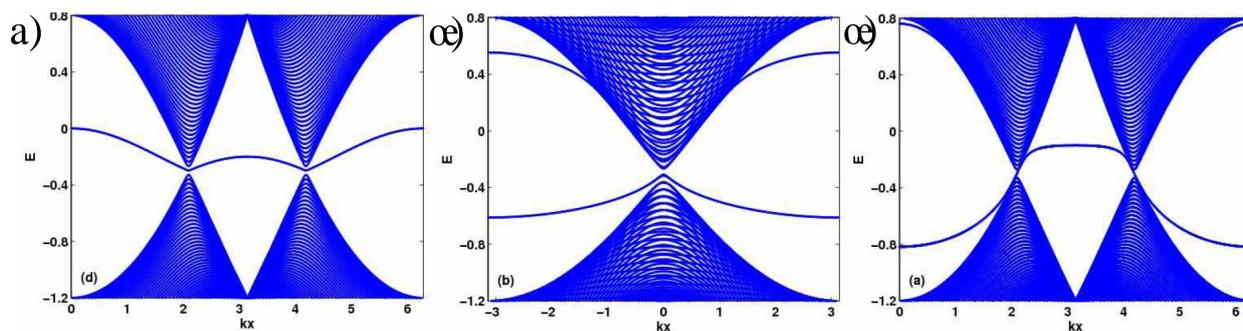


Рис. 4. Энергетический спектр для графеновой нанополосы с краями типа (а) зигзаг - частотокл при учете следующих за ближайшими соседями модели сильной связи, без учета релаксации (б) с двумя краями типа кресло с учетом релаксации (в) с двумя краями зигзаг с учетом релаксации. Из работы [63].

нии локальной плотности метода функционала плотности с использованием псевдопотенциалов для достаточно широкой полосы графена результаты работы [66] повторяют бесщелевой спектр для полосы с краями типа зигзаг, полученный этими же авторами в рамках приближения ближайших соседей МСС. Свободные связи атома углерода на границе пассивировались атомами водорода. Из более сложных расчетов [67–71] (см. также обзор [3]) следует, что край типа зигзаг испытывает реконструкцию, обозначаемую $zz(57)$, а при нормальных условиях (температуре 273 К и атмосферном давлении) в воздухе пассивирование атомами водорода граничных атомов углерода, видимо, не происходит.

Наконец, рассмотрим сложившуюся ситуацию с КС, которые могут быть получены в «непрерывном» описании графена с помощью уравнения Дирака. Один из способов описания границы графена, уже обсуждавшийся выше, состоит в введении эффективной щели (или массы) в гамильтониан графена [72–74] с последующим устремлением ее в области соответствующей вакууму к бесконечности. При этом, как было показано в первом пункте обзора, наличие или отсутствие КС зависит от способа введения щели. В процитированных работах щель введена так, что КС отсутствуют.

В работе [75] для границ типа зигзаг и кресло были предложены граничные условия, соответствующие приближениям ближайших соседей модели сильной связи:

armchair —

$$\begin{aligned} (F_1 e^{i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}} + F_4 e^{-i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}})|_S &= 0, \\ (F_2 e^{i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}} + F_3 e^{-i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}})|_S &= 0, \end{aligned} \quad (24)$$

где $2\mathbf{k}_0$ - расстояние между долинами.

zigzag (если граница составлена из атомов типа А) —

$$\begin{aligned} F_1|_S &= 0, \\ F_4|_S &= 0. \end{aligned} \quad (25)$$

Эти ГУ получили довольно широкое распространение [57]. Однако, их обоснованность, по существу, отсутствует.

Наконец, ряд работ был посвящен вопросу о том, какие ГУ в принципе возможны исходя из общих физических соображений. В работе [76] к гамильтониану Дирака был добавлен член $M\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_S)$, где M — матрица 4×4 , представляющий дельта-функцию (прижатую к бесконечно высокому барьеру), расположенному на границе S графена. Откуда было получен ГУ:

$$(1 - M)F|_S = 0. \quad (26)$$

Исходя из непроницаемости барьера было показано, что матрица M удовлетворяет следующим условиям:

$$M^2 = 1, \quad M^+ = M, \quad \{\mathbf{n} \times \boldsymbol{\Sigma}, \mathbf{M}\} = \mathbf{0}, \quad \boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & -\sigma \end{pmatrix}, \quad (27)$$

где $\{\}$ — антикоммутатор. Это ГУ содержит 6 произвольных параметров и довольно трудоемко для использования.

В работе [77] было дополнительно потребовано, чтобы матрица M коммутировала с оператором обращения времени. В таком случае матрица M определяется двумя единичными векторами (содержащими всего три произвольных параметра) ν и \mathbf{m} , причем $\mathbf{m} \perp \mathbf{n}$, \mathbf{n} — вектор нормали к границе. Ее можно записать в виде

$$M = (\nu\sigma) \otimes (\mathbf{m}\sigma), \quad \mathbf{m} \perp \mathbf{n}, \quad (28)$$

где \otimes — прямое произведение матриц, σ — матрицы Паули. Авторы этой работы не учли междолинное расстояние и, в конечном счете, отдали предпочтение МСС.

Экспериментальное наблюдение КС в графене. Первые же экспериментальные работы по узким полоскам (наноламентам) графена [78, 79] показали, что даже если энергетическая щель в такой ленте и определяется КС, то эта щель не зависит от ориентации графена. Работы по рамановской спектроскопии краев графена несколько усложняют картину. Так, в [80] подтверждаются

выводы предыдущих работ по транспортным свойствам нанолент: «несмотря на то, что край может казаться макроскопически гладким и ориентированным под определенным углом, он [край] необязательно микроскопически упорядочен». В работе же [81] утверждается, что края графена в основном все же ориентированы по зигзагу или креслу, что устанавливается по интенсивности рамановской D линии, которая мощнее для краев типа кресло и слабее для края зигзаг.

В работах [82, 83] КС наблюдались методом сканирующей туннельной микроскопии. При этом авторам удалось установить кристаллографическую ориентацию краев (не имея при этом атомного разрешения). Было показано, что действительно на зигзаге наблюдаются КС, при этом пик локальной плотности состояний смещен относительно точки Дирака, что может свидетельствовать о наличии дисперсии КС для идеального зигзага. Доля идентифицированных краев составила не более 50%. Интересно, что пик плотности состояний для края типа зигзаг мог наблюдаться как в валентной зоне, так и в зоне проводимости!

Подведем итог этой части обзора. Несмотря на уже относительно богатую историю исследований КС в графене, существующие модели КС не могут окончательно ответить на вопрос о том какие перестройки и реконструкции происходят на реальном краю графена, а также о том какие КС могут существовать краях отличных от зигзага или армчеера по кристаллографическому направлению. Простейшая модель сильной связи в приближении ближайших или следующих за ближайшими соседями, видимо, слишком груба. Тем не менее, она дает представление о том какие КС в принципе возможны. Подобная ситуация имеет место и в более сложных моделях, использующих, например, теорию функционала плотности. В простейших случаях (без учета сильных межчастичных корреляций и спиновых эффектов) их результаты качественно совпадают с расчетами в модели сильной связи. Численные модели имеют и еще один недостаток - их довольно сложно использовать при расчетах различ-

ных эффектов, в которых важна сложная геометрия структуры, присутствует магнитное или переменное электрическое поле и т.д.. Эксперименты по КС пока тоже противоречивы и не могут служить доказательством той или иной теории КС. Это заставит нас отказаться от точных микроскопических моделей и при описании КС в графене в первой главе обратиться к рассмотренной в первом пункте обзора феноменологической теории.

3. 2D топологические изоляторы.

Исследование краевых состояний в графене привело к новым физическим эффектам. Так, в работе [84] в рамках модели сильной связи с учетом спин-орбитального взаимодействия получен спектр для графеновой полосы с краем типа зигзаг, рис. 5. Спин-орбитальное взаимодействие приводит к образованию щели в объеме графена. В указанной работе, в рамках рассматриваемой модели спин-орбитального взаимодействия, было получено, что в щели существуют спин-поляризованные (или киральные) КС - электроны двигающиеся направо имеют спин противоположный тем, которые двигаются налево. Это приводит к тому, что если уровень Ферми расположен в объемной щели, то во внешнем электрическом поле на краю графена возникает ненулевой спиновый ток:

$$\mathbf{J}_s = \frac{\hbar}{2e} (\mathbf{J}_\uparrow - \mathbf{J}_\downarrow) = \sigma_{xy}^s \mathbf{E}, \quad (29)$$

где $J_{\uparrow(\downarrow)}$ — электрической ток, обусловленный электронами бегущими направо (налево). Причем возникает квантование «спиновой» проводимости (КС двукратно вырождены):

$$\sigma_{xy}^s = \frac{e}{2\pi}. \quad (30)$$

Т.е. спиновая проводимость квантуется подобному тому, как квантуется электронная недиагональная проводимость в квантовом эффекте Холла. Такой эффект получил название Квантового спинового эффекта Холла, а состояние вещества, в котором возможен такой эффект, стали называть квантовое спин-хол-

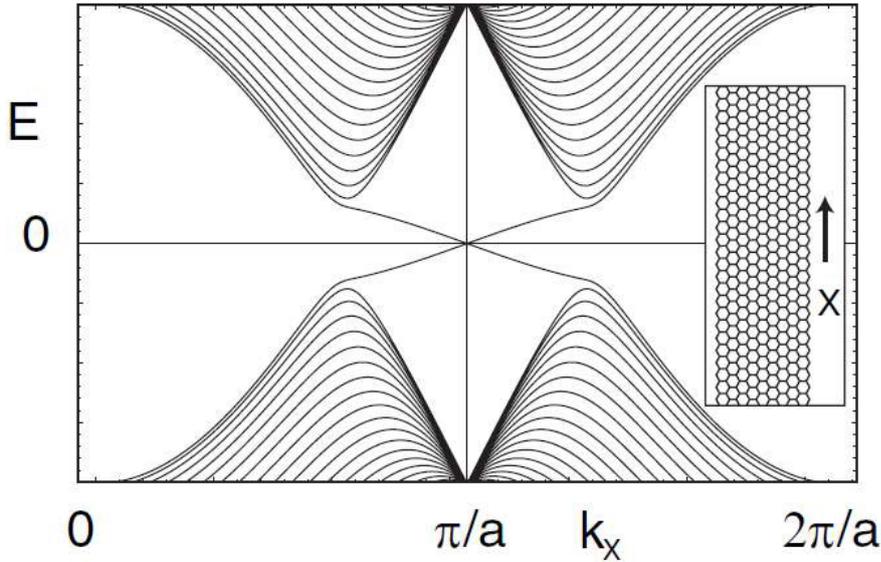


Рис. 5. Проективная зонная структура для полосы графена из работы [84].

ловское состояние (от англ. quantum spin Hall state). К нарушению квантования такой спиновой проводимости приводит множество эффектов. Кроме того, непосредственно обнаружить спиновый ток сложно, тем более в графене, в котором величина спин-орбитального расщепления очень мала - около 10^{-3} мэВ [85]).

Развитие работы [84] (и многих других) привело к созданию концепции топологического изолятора (ТИ) - материала, в котором существование краевых (или поверхностных в 3D случае) состояний в запрещенной зоне защищено топологическим инвариантом (индексом) Z_2 [86–88]. При изменении параметров гамильтониана этот индекс может измениться только если закроется объемная щель. Для вакуума Z_2 -инвариант тривиальный (нулевой) [89]. Для нетривиального, т.е. топологического изолятора (у которого Z_2 не ноль) из теории соответствия граница-объем (bulk-boundary correspondance) [4, 5] следует существование на границе бесщелевых КС. Однако, топологические соображения не позволяют определить электронный спектр краевых состояний, на который неизбежно должны влиять конкретные условия на поверхности

Было показано, что в квантовых ямах CdTe/HgTe при определенных параметрах (толщина и состав) должна возникать фаза 2D топологического изо-

лятора [90].

CdTe и HgTe, являясь представителями полупроводниковых соединений A_2B_6 с кристаллической структурой цинковой обманки, могут быть описаны гамильтонианом бхб модели Кейна, в котором пренебрегается спин-орбитально отщепленной зоной Γ_7 . Чтобы получить спектр в квантовой яме выращенной вдоль направления $[001]$ по оси z обычно сначала рассматривают гамильтониан с изменяющимися вдоль оси z параметрами $\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2, P$ при $k_x = k_y = 0$ [90–92]:

$$H_0 = \begin{pmatrix} k_z \gamma_0 k_z & 0 & 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} P k_z & 0 & 0 \\ 0 & k_z \gamma_0 k_z & 0 & 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} P k_z & 0 \\ 0 & 0 & -k_z \gamma_- k_z & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{\frac{2}{3}} P k_z & 0 & 0 & k_z \gamma_+ k_z & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} P k_z & 0 & 0 & k_z \gamma_+ k_z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & k_z \gamma_- k_z \end{pmatrix}, \quad (31)$$

Для простоты здесь положено $\hbar = 1$. Параметры γ можно связать со стандартными коэффициентами модели Кейна: $\gamma_{\pm} = \gamma_1 \pm 2\gamma_2$, $\gamma_0 \approx \frac{1}{2m_0} + \frac{P^2}{3\Delta}$. Остальная часть гамильтониана Кейна бхб рассматривается по теории возмущений. В качестве нулевого приближения используются четыре собственные функции H_0 в виде $(f_1(z), 0, 0, f_4(z), 0, 0)^T$, $(0, f_2(z), 0, 0, f_5(z), 0)^T$, $(0, 0, f_3(z), 0, 0, 0)^T$, $(0, 0, 0, 0, 0, f_6(z))^T$ так чтобы $f_{1,2}(z)$ были четными функциями z , а $f_{4,5}(z)$ соответственно нечетными (волновые функции с нечетными $f_{1,2}$ для характерных параметров квантовых ям CdHgTe можно не учитывать [90, 91]). С помощью этих собственных функций строится теория возмущений по импульсу, параллельному слоям роста квантовой ямы, и получается эффективный гамильтониан:

$$H_{eff} = \begin{pmatrix} H(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & H^*(-\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} M - B_+ k^2 & A k_- \\ A k_+ & -M + B_- k^2 \end{pmatrix}, \quad (32)$$

где $\hbar \mathbf{k} = \hbar(k_x, k_y, 0)$ — 2D импульс, M — энергетический параметр, определяющий ширину запрещенной зоны, A/\hbar — эффективная скорость света ($A > 0$).

Параметры $B_{\pm} = B \pm D < 0$ — отвечают за дисперсию массы и приводят к модификации дираковского спектра. В топологической фазе $M < 0$. Знак параметров B_{\pm} и M имеет существенное значение для появления фазы ТИ [5, 93]. В таблице 1 приведено значение параметров гамильтониана (32) для различных толщин квантовых ям d из обзора [5].

Таблица 1. Характерные значения параметров гамильтониана (32) из работы [5].

d [Å]	A [эВ·Å]	B [эВ·Å ²]	D [эВ·Å ²]	M [эВ]
55	3.87	-48.0	-30.6	0.009
70	3.65	-68.6	-51.2	-0.01

Существование фазы топологического изолятора в квантовых яме Cd(Hg)Te экспериментально было показано в работе [6].

Отметим, что рассмотренная в начале модель полупроводника с дираковским спектром и ПС [49] с точки зрения топологического инварианта Z_2 должна считаться тривиальным изолятором (во всяком случае до тех пор пока она не будет расширена на всю зону Бриллюэна) [5, 93, 94] также, как и материал $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ при любом составе x [4].

4. 1D плазменные колебания

Электромагнитные волны в однородных системах исследуются уже более ста лет [95]. Закон дисперсии 1D длинноволновых плазменных колебаний в системе электронов с произвольным изотропным спектром $E(k)$ можно получить из классических уравнений движений, а именно, из уравнения непрерывности и уравнении Эйлера. Пусть электроны заполняют тонкую проволоку, ориентированную вдоль оси y . Будем считать, что ионы образуют равномерно заряженный фон (модель желе). Рассматривая малые возмущения электронной плотности $\delta\rho$, тока $\delta j = en\delta v$ (здесь n — равновесная 1D концентрация электронов), скорости δv и импульса δp , с учетом уравнения Пуассона после фурьирования

по (x, z) и в пренебрежении членом с градиентом давления можно получить линеаризованную систему уравнений:

$$\begin{cases} \omega\delta\rho - q\delta j = 0 \\ \omega\delta p = -eq\varphi(q) \\ \varphi(q) = \delta\rho \int \frac{e^{iqy}}{\sqrt{y^2+a^2}} dy = 2K_0(qa)\delta\rho \end{cases}, \quad (33)$$

где φ — электрический потенциал, $e > 0$ — абсолютная величина заряда электрона. Расходящийся в последнем уравнении интеграл - фурье-образ кулоновского взаимодействия в нити - нужно обрезать введением масштаба a , связанного с конечным размером 1D системы. $K_0(qa)$ - функция Макдональда [96], имеющая логарифмическую асимптотику на малых положительных аргументах $K_0(x) \approx -\ln(x)$. Так как рассматриваются длинноволновые плазменные колебания (с малыми q), то можно связать изменение скорости δv с изменением импульса δp считая, что вклад в эти величины вносят только электроны вблизи поверхности Ферми. Тогда

$$\delta j = -en\delta v = -\frac{en\delta p}{m_F}, \quad (34)$$

где для произвольного изотропного спектра введена масса на уровне Ферми:

$$m_F v_F = m_F \left. \frac{\partial E}{\hbar \partial k} \right|_{k_F} = \hbar k_F. \quad (35)$$

Решая систему уравнений (33) получаем выражение для классического 1D плазмона:

$$\omega_1^{cl} = \sqrt{\frac{2e^2 n}{m_F}} q \sqrt{|\ln(qa)|}. \quad (36)$$

В квантовой механике классические уравнения движения нужно заменить квантовым, например, на матрицу плотности [97]:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{\rho}]. \quad (37)$$

Потенциальная энергия электрона $e\varphi$, возникающая из-за плазменных колебаний, рассматривается как возмущение в гамильтониане \hat{H} . Она вызывает

возмущение $\delta\rho_1$ в матрице плотности:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + e\varphi, \quad \hat{\rho} = \hat{\rho}_0 + \hat{\rho}_1. \quad (38)$$

Самосогласованно вычисляя возмущение электронной плотности и подставляя его в уравнение Пуассона, можно найти выражение для диэлектрической проницаемости $\epsilon_{yy}(\mathbf{q}, \omega)$. Причем, в длинноволновом пределе межэлектронное взаимодействие можно не учитывать и выражение для диэлектрической проницаемости будет такое же, как и в рамках приближения хаотических фаз. Нули диэлектрической проницаемости $\epsilon_{yy}(\mathbf{q}, \omega) = 0$ определяют закон дисперсии плазмона:

$$1 - v(q)\Pi(\mathbf{q}, \omega) = 0, \quad (39)$$

в котором введены поляризационный оператор

$$\Pi(\mathbf{q}, \omega) = \sum_k \frac{f_0(E_{k-q}) - f_0(E_k)}{E_{k-q} - E_k + \hbar\omega + i0}, \quad (40)$$

и усредненное кулоновское взаимодействие

$$v(\mathbf{q}) = \int |\psi_{k_F}(x, z)|^2 |\psi_{k_F}(x', z')|^2 \left[\int \frac{e^{iqy} dy}{\sqrt{(x-x')^2 + y^2 + (z-z')^2}} \right] dx dz dx' dz'. \quad (41)$$

Используя вышеописанную схему для «шредингеровских» электронов (т.е. электронов со спектром $E(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$) в работе [98] была найдена в длинноволновом пределе диэлектрическая проницаемость 1D системы, а затем в работе [99] был получен закон дисперсии 1D плазмона:

$$\omega_1^{quant} \approx q \sqrt{\frac{2e^2 v_F}{\pi \hbar} |\ln(aq)|}. \quad (42)$$

После подстановки скорости Ферми, выраженной через концентрацию и массу:

$$v_F = \frac{\hbar k_F}{m} = \frac{\pi \hbar n}{m}, \quad (43)$$

легко видеть, что длинноволновый квантовый закон дисперсии плазменных колебаний (42), найденный из квантовых уравнений движения, в точности совпа-

дает с классическим выражением (36), найденным в гидродинамическом приближении. Экспериментально закон дисперсии 1D плазмона был измерен в узких полосках 2D электронного газа (со спектром $E(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$) в работах [100–103]. Результаты измерений подтвердили справедливость теоретического закона дисперсии.

С открытием графена появился интерес и к плазменным колебаниям в системе дираковских фермионов. Так, в 2009 году в работе [104] были рассмотрены колебания «безмассовой дираковской плазмы», т.е. плазмы состоящей из безмассовых дираковских фермионов, для систем разной размерности. Для закона дисперсии плазмона в 1D системе была получена формула

$$\omega_1^{Dirac} = \sqrt{\frac{ge^2}{\pi\epsilon_s\hbar v_F}} q \sqrt{|\ln(qa)|}, \quad (44)$$

где g — кратность вырождения, ϵ_s — средняя диэлектрическая проницаемость окружающей среды, a — параметр обрезания 1D кулоновского взаимодействия, связанный с конечным латеральным размером системы, v_F — скорость Ферми.

Глава 1

Краевые (таммовские) состояния в графене

В этой главе предложено и проанализировано простое феноменологическое описание края графена в рамках двухзонной теории эффективной массы. В разделе 1.1, используя общие физические соображения (эрмитовость и инвариантность относительно обращения времени), получены граничные условия (ГУ) для гамильтониана типа Дирака, описывающего электроны в графене в отсутствие и при наличии междолинного рассеяния. Используя полученные ГУ проанализированы электронные спектры в простейших геометриях: полуплоскость и полоса без магнитного поля (раздел 1.2) и с ним (1.3), квантовая точка и антиточка без (1.4) и с магнитным полем (1.5). В последнем разделе 1.6 проанализировано сечение рассеяния на антиточке (без магнитного поля). Основное внимание уделено случаю отсутствия междолинного рассеяния.

1.1. Граничное условие для огибающих функций

Для того, чтобы описывать электроны в графене в двухдолинном приближении надо «разбить» зону Бриллюэна на две части (вблизи K и K' точек). При этом полная волновая функция электрона $\Psi(\mathbf{r})$ выражается через четырехкомпонентный столбец огибающих $(\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4)^T = (\psi, \psi')^T$:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \psi_1 u_{1K} + \psi_2 u_{2K} + \psi_3 u_{1K'} + \psi_4 u_{2K'}, \quad (1.1)$$

где $u_{1K(K')}, u_{2K(K')}$ — блоховские амплитуды в точке $K(K')$ [43]. Следуя стандартной схеме Кона-Латтинджера, для огибающих можно получить уравнение:

$$c^* \begin{pmatrix} \sigma(\mathbf{p} + \hbar\mathbf{k}_0) & 0 \\ 0 & -\sigma(\mathbf{p} - \hbar\mathbf{k}_0) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi \\ \psi' \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi \\ \psi' \end{pmatrix}. \quad (1.2)$$

Или в сокращенном виде $sc^* \sigma(\mathbf{p} + s\hbar\mathbf{k}_0) \psi_s = E\psi_s$, где введено долинное число $s = \pm 1$. Такое представление гамильтониана отличается от общепринятого (19)

тем, что междолинное расстояние $2\mathbf{k}_0$ учитывается явно. Простым унитарным преобразованием:

$$S = \begin{pmatrix} e^{i\hbar\mathbf{k}_0\mathbf{r}} & 0 \\ 0 & e^{-i\hbar\mathbf{k}_0\mathbf{r}} \end{pmatrix}, \quad (1.3)$$

можно свести это представление гамильтониана к обычно используемому (19). Преобразование диагонально по долинам, поэтому если не учитываются междолинные переходы, то не имеет смысла делать различие между двумя представлениями гамильтониана. В гамильтониане нет междолинных членов, однако, такие члены могут быть в ГУ. Поэтому общий вид ГУ для гамильтониана первого порядка (1.2) должен иметь вид:

$$\begin{pmatrix} A & B \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi \\ \psi' \end{pmatrix} \Big|_S = 0. \quad (1.4)$$

Здесь A, B — некоторые (пока произвольные) матрицы 2×2 .

На границе кристаллический потенциал обрывается, так что для электронов образуется барьер. Следует различать два случая - плавный (на межатомных расстояниях) барьер и резкий. В случае плавного барьера электрон отражаясь от границы не может перескочить из одной долины в другую, т.к. долины разнесены на довольно большой (сравнимый с размером зоны Бриллюэна) вектор. Но для кристаллографической ориентации границы не очень близкой к креслоподобной даже если барьер резкий ввиду того, что проекция квазиимпульса электрона на границу при отражении должна сохраняться, электрон снова не сможет перескочить из одной долины в другую. Если бы такое было возможно, то волновая функция электрона содержала бы резкие (на атомных масштабах) компоненты и эффективное описание с помощью огибающих было бы не применимо (об этом ниже). Таким образом, можно ожидать, что для определенного класса границ электрон при отражении от границы не меняет долину. В таком случае ГУ должно быть диагональным по долинам, т.е. компоненты ψ и ψ' не перемешиваются. Это возможно, когда детерминанты матриц

A и B равны нулю. Назовем такое ГУ незапутывающим или ГУ в отсутствие междолинного рассеяния. В этом случае электроны в графене могут описываться как два независимых «нейтрино Вейля» (или, по другому, вейлевский фермион). Для каждого такого нейтрино имеется свое ГУ, см. приложение А. Если вспомнить о симметрии по отношению к инверсии времени, то эти нейтрино оказываются связанными.

Оператор инверсии времени в графене, отвечающий комплексному сопряжению полной волновой функции [57], в нашем представлении имеет вид (см. также Приложение Б):

$$T_G = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 \\ \sigma_1 & 0 \end{pmatrix} K_0, \quad (1.5)$$

где K_0 — оператор комплексного сопряжения.

Требование симметрии незапутывающего ГУ по отношению к инверсии времени приводит к следующему общему виду ГУ на границе S :

$$\boxed{(\psi_1 + ia e^{-i\alpha} \psi_2)|_S = 0}, \quad (1.6)$$

$$\boxed{\left(\psi_3 + \frac{ie^{-i\alpha}}{a} \psi_4\right)|_S = 0}. \quad (1.7)$$

Здесь α — угол между нормалью к границе и осью x (разумеется, ось x можно выбрать произвольно). Незапутывающее ГУ содержит только один безразмерный действительный параметр a , как и для одного нейтрино Вейля. В используемой нами теории это феноменологический параметр. Его значение в принципе может быть найдено из микроскопических расчетов или эксперимента. Ниже будет проведено сравнение с расчетами в рамках модели сильной связи. Некоторые оценки параметра a для реконструированной границы графена типа зигзаг можно также найти в [105]. Мы же, по указанным еще в Обзоре литературе причинам, всюду ниже будем считать его неизвестным.

ГУ (1.6) можно пояснить следуя работе [53], обсуждавшейся в Обзоре Литературы. Рассмотрим гамильтониан (19) и добавим к нему эффективный по-

тенциал $V(\mathbf{r})$, представляющий собой комбинацию электростатического и подрешеточного (staggered) потенциала:

$$V(\mathbf{r}) = m_1(\mathbf{r})\sigma_0 + m_2(\mathbf{r})\sigma_z, \quad (1.8)$$

Электростатический потенциал можно трактовать как работу выхода (или сродство электрона к вакууму), а подрешеточный необходим для того чтобы открыть щель в спектре и, тем самым, "запереть" электроны в области графена. "Массы" $m_{1,2}(\mathbf{r}) = 0$ в графене. Если $m_{1,2}(\mathbf{r})$ вне области с графеном гораздо больше, чем характерные энергии в графене (ширина валентной зоны и зоны проводимости), т.е. $m(\mathbf{r}) \rightarrow \infty$, тогда волновая функция почти не проникает наружу графена и такой потенциал позволяет описать границу графена. Следуя работе [72] перейдем к координатам (n, s) , направленным вдоль (s) и перпендикулярно (n) поверхности. Тогда гамильтониан будет иметь вид:

$$\begin{pmatrix} m_1(\mathbf{r}) + m_2(\mathbf{r}) & -ie^{-i\alpha}\hbar(\partial_n - i\partial_s) \\ -ie^{i\alpha}\hbar(\partial_n + i\partial_s) & m_1(\mathbf{r}) - m_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (1.9)$$

Для потенциалов, заданных ступенчатой функцией Хевисайда $m_1(n) = m_1\Theta(-n)$, $m_2(n) = m_2\Theta(-n)$, нетрудно найти волновые функции уравнения Шредингера с этим гамильтонианом для фиксированного импульса k_s вдоль границы при $n > 0$ и $n < 0$ и сшить их при $n = 0$. Указанная процедура приводит к эффективному ГУ:

$$\frac{\psi_1}{\psi_2} \Big|_S \rightarrow ie^{-i\alpha} \sqrt{\frac{m_2 - m_1}{m_2 + m_1}} \text{sign}(m_2 - m_1) \text{ при } m_{1,2} \rightarrow \infty \quad (1.10)$$

Отсюда следует однозначная связь параметра ГУ a с параметрами эффективного потенциала:

$$a = \sqrt{\frac{m_2 - m_1}{m_2 + m_1}} \text{sign}(m_1 - m_2) \quad (1.11)$$

Пользуясь этим равенством, иногда удобнее переписать эффективный потенциал через параметр a :

$$V(\mathbf{r}) = \frac{m(\mathbf{r})}{2} [(1 - a^2)\sigma_0 + (1 + a^2)\sigma_z]. \quad (1.12)$$

Граничное условие Берри-Мандрагона [72], которое иногда называют ГУ бесконечной массы (infinite mass), получается отсюда при $m_1 = 0$ и соответствует $a = 1$.

Следует отметить, что формулировка ГУ на языке эффективных потенциалов по существу учитывает только две зоны (валентную и зону проводимости), в то время как остальные зоны могут существенно влиять на ГУ.

Отметим, что при $|a| \neq 1$ нарушается электрон-дырочная симметрия, которая имеет место в неограниченном графене. Также стоит заметить, что для любого параметра a эффективный потенциал $V(\mathbf{r})$ содержит подрешеточный потенциал. Известно, что любой скалярный потенциал в графене из-за клейновского туннелирования не дает связанных состояний, за исключением состояний с нулевой энергией [106] или квазистационарных состояний вблизи сверхкритической примеси [107]. Наличие только подрешеточного потенциала также не приводит к возникновению связанных состояний [72]. Комбинация же скалярного и подрешеточного потенциала приведет, как мы увидим ниже, к образованию локализованных у границы краевых состояний в широком интервале энергий, стационарных на идеальной трансляционно-инвариантной линейной границе.

Найдем электронный спектр для графеновой полуплоскости $z = 0$, $x > 0$, если граничный параметр a постоянен вдоль границы. Для этого решим уравнение (1.2) с ГУ (1.6). Среди решений будут как объемные, представляющие собой падающие и отраженные от границы плоские волны, так и краевые, волновая функция которых локализованы у границы. Последние мы будем называть таммовскими состояниями (ТС), т.к. они обусловлены только наличием трансляционно-инвариантной (кристаллической) границы графена. Это будет особенно удобно при обсуждении спектров в магнитном поле, чтобы отличать их от магнитных краевых состояний (скачущих электронов). Зона ТС в плоскости $E(k_y)$ представляет собой лучи, стартующие из проекции центра долин на направление края, $\pm k_{0y} = \pm k_0 \sin \alpha$, рис. 1.1. Аналитическое выражение для

спектра ТС имеет вид:

$$E_s = s \frac{2a}{1+a^2} \hbar c^* (k_y + s k_{0y}), \quad s(k_y + s k_{0y})(1-a^2) > 0. \quad (1.13)$$

$s = +1$ в долине K , центр которой $-k_{0y}$ и $s = -1$ в долине K' с центром k_{0y} .

Волновые функции ТС:

$$\psi(x) \propto \exp\left(ik_y y - x(k_y + k_{0y}) \frac{1-a^2}{1+a^2}\right) \quad (s = +1), \quad (1.14)$$

$$\psi'(x) \propto \exp\left(ik_y y + x(k_y - k_{0y}) \frac{1-a^2}{1+a^2}\right) \quad (s = -1). \quad (1.15)$$

Можно отказаться от предположения о плавности граничного потенциала и рассмотрим общее ГУ, которое содержит междолинные члены. В этом случае можно считать, что $\det A \neq 0$ и общее ГУ можно записать в следующем виде:

$$\psi + A^{-1} B \psi'|_S = \psi + i g \psi'|_S = 0, \quad (1.16)$$

где g — пока произвольная матрица 2×2 . Рассмотрим какие ограничения на ее вид накладывает условие симметрии по отношению к инверсии времени.

T-обращенное ГУ имеет вид:

$$\begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 \\ \sigma_1 & 0 \end{pmatrix} \hat{K}_0 \begin{pmatrix} 1 & i g \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 \\ \sigma_1 & 0 \end{pmatrix} \hat{K}_0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -\sigma_1 g^* \sigma_1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (1.17)$$

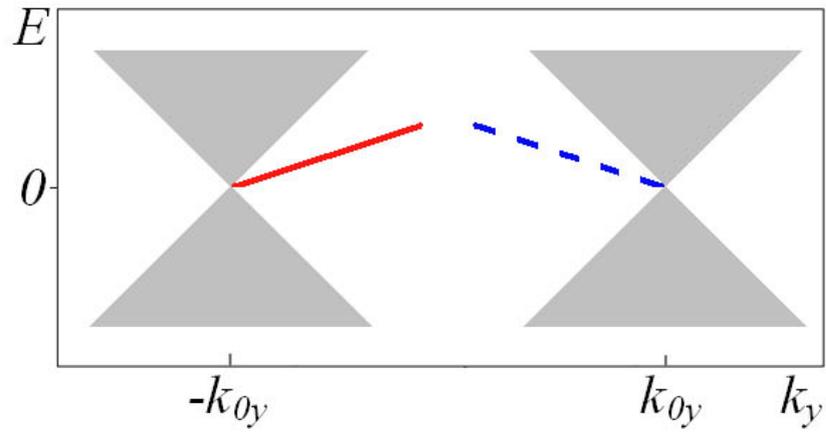
Оно должно сводиться к ГУ, необращенному по времени. Отсюда получаем первое ограничение на матрицу g :

$$(\sigma_1 g^* \sigma_1)^{-1} = -g. \quad (1.18)$$

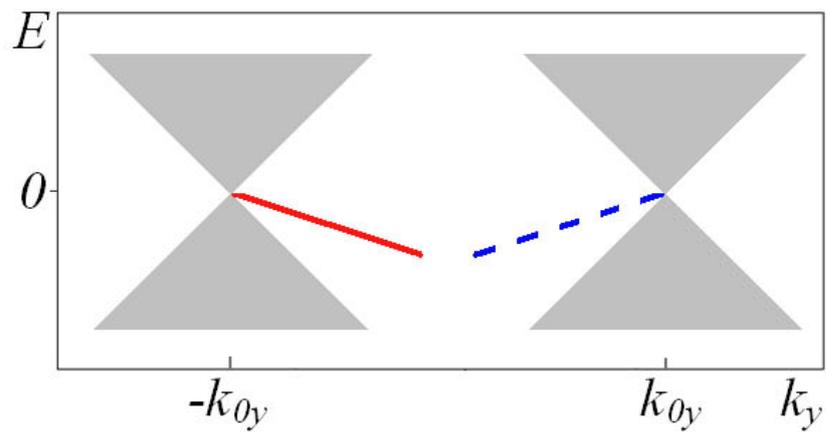
Далее, используем эрмитовость гамильтониана. Для произвольных биспиноров $(\psi, \psi')^T$, $(\varphi, \varphi')^T$ должно выполняться условие:

$$(\psi^+ \sigma \mathbf{n} \varphi - \psi'^+ \sigma \mathbf{n} \varphi')|_S = 0. \quad (1.19)$$

Заметим, что отсюда следует отсутствие нормальной компоненты тока. Вообще же эрмитовость более сильное требование, чем требование отсутствия тока на



(a)



(б)

Рис. 1.1. Электронный спектр $E(k_y)$ графеновой полуплоскости в пренебрежении междолинным рассеянием на границе. Серая закрашенная область отвечает непрерывному спектру, жирная (красная) прямая - таммовским состояниям в долине $s = +1$, жирный (синий) пунктир - таммовским состояниями в долине $s = -1$. Таммовские состояния могут существовать как зоне проводимости, рис. а (граничный параметр $a \in (1, \infty)$), так и в валентной зоне, рис. б (граничный параметр $a \in (0, 1)$).

границе. Используя ГУ (1.16) находим второе ограничение на матрицу g :

$$g^\dagger \sigma \mathbf{n} g = \sigma \mathbf{n}. \quad (1.20)$$

Используя полученные выше ограничения на матрицу g , можно найти общий вид этой матрицы:

$$(\psi + ig\psi')|_S = 0, \quad g = \frac{e^{i\phi}}{\sin \beta} \begin{pmatrix} \cos \gamma + \cos \beta & ie^{-i\alpha} \sin \gamma \\ ie^{i\alpha} \sin \gamma & \cos \gamma - \cos \beta \end{pmatrix}. \quad (1.21)$$

Что можно записать более компактно:

$$g = \frac{e^{i\phi}}{\sin \beta} (e^{i\gamma \sigma \mathbf{n}} + \sigma_3 \cos \beta), \quad (1.22)$$

где γ , β , ϕ — действительные параметры ("углы"), которые можно отождествить с параметрами, полученными в работе [77]. Чтобы избежать неоднозначности связанной с углами, договоримся считать, что все параметры-углы меняются от 0 (включительно) до 2π (не включительно). Детерминант матрицы $\det g = e^{2i\phi} \sin \beta$ обращается в ноль при $\sin \beta = 0$, как и следовало ожидать. В этом пределе получается ГУ в отсутствие междолинного рассеяния, при этом параметр γ связан с параметром a : $2a/(1+a^2) = \sin \gamma$, $(1-a^2)/(1+a^2) = \cos \gamma$. Другой интересный предел - "сильное междолинное взаимодействие": $\cos \beta = 0$. В этом случае мы получаем ГУ по форме совпадающее с ГУ для уравнения Дирака (8). Подчеркнем, что уравнение Дирака, обсуждаемое в [49], а также уравнение Дирака, описывающее настоящие релятивистские электроны, имеют отличный от графена оператор инверсии времени. Это приводит к более богатому набору граничных условий в графене.

1.2. Электронный спектр полуплоскости и полосы

Обсудим какие возможны ТС на прямолинейной границе графена с общим ГУ, учитывающим междолинные переходы. Граничные параметры будем

считать константами, что должно быть справедливо для трансляционно инвариантной границы с не очень большими индексами Миллера. Найдем спектр гамильтониана (1.2) на полуплоскости $z = 0$, $x > 0$ с ГУ (1.21). Для сокращения записи положим $\hbar = c^* = 1$. Волновые функции ТС имеют вид $\psi \sim e^{(ik_{0x}-\lambda)x}$ и $\psi' \sim e^{(-ik_{0x}-\lambda')x}$, где $\lambda = \sqrt{(k_y - k_{0y})^2 - E^2}$, $\lambda' = \sqrt{(k_y + k_{0y})^2 - E^2}$, $k_{0x} = k_0 \cos \alpha$, $k_{0y} = k_0 \sin \alpha$. При этом под \mathbf{k}_0 , видимо, нужно понимать не просто вектор, соединяющий две соседние долины в обратной решетке, а вектор, соединяющий две различные долины, проекции которых на край определяют долины в 1D (проективной) зоне Бриллюэна (см. проективную зонную структуру в разделе 2 Обзора литературы). Из вида волновых функций понятно, что при больших k_{0y} , возникающих, например, на границе типа кресло, волновые функции содержат быстро-падающую экспоненту, что не удовлетворяет приближению плавных огибающих. В таком случае, нельзя гарантировать, что найденное ГУ описывает электронный спектр ТС. Если ГУ все же описывает ТС (случай малых k_{0y} и k_y), можно получить неявное уравнение, описывающее электронный спектр $E(k_y)$ (при $E \neq 0$):

$$(\lambda + k_y - k_{0y}) \left[(\lambda' + k_y + k_{0y}) + \frac{\cos \gamma + \cos \beta}{\sin \gamma} E \right] + \frac{\cos \gamma - \cos \beta}{\sin \gamma} (\lambda' + k_y + k_{0y}) E = E^2. \quad (1.23)$$

Двукратным возведением в степень это уравнение, в принципе, можно свести к алгебраическому уравнению 4-го порядка

$$\begin{aligned} & E^4 \cos^2 \beta + 2E^3 k_{0y} \cos \beta \sin \gamma (1 + \cos \beta) + \\ & E^2 \left[k_{0y}^2 \sin^2 \gamma (5 \cos^2 \beta + 1) - \frac{1}{4} k_{0y}^2 \sin^2 2\beta + k_y^2 (\sin^2 \beta - \sin^2 \gamma (1 + \cos^2 \beta)) \right] + \\ & 2E k_{0y} \cos \beta \sin \gamma (\cos(2\gamma) - \cos^2 \beta) (k_y^2 - k_{0y}^2) + \\ & \sin^2 \gamma (\cos^2 \beta - \cos^2 \gamma) (k_y^2 - k_{0y}^2)^2 = 0, \end{aligned} \quad (1.24)$$

которое, однако, при каждом k_y содержит, как минимум, два лишних корня по энергии за которыми необходимо следить (что не приятно). Проще рассмотреть аналитически наиболее интересные частные случаи, а, при необходимости, весь

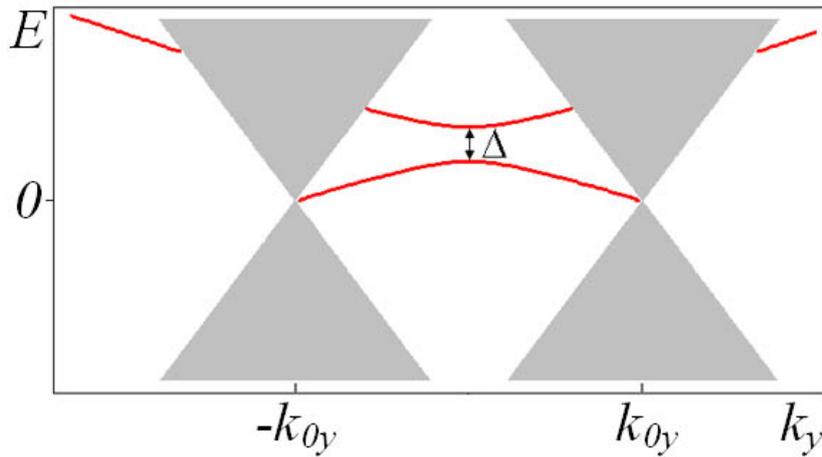


Рис. 1.2. Электронный спектр $E(k_y)$ графеновой полуплоскости при учете междолинного рассеяния в граничном условии. Закрашенная область отвечает непрерывному спектру, красные кривые - таммовским состояниям. Граничные параметры $\gamma \in (0, \pi/2)$, $\beta \in (0, \pi/2)$.

спектр можно найти численно. Так, например, результат численного расчета с помощью математического пакета Maple представлен на рис. 1.2.

Проанализируем здесь некоторые частные случаи. Во-первых, в случае отсутствия междолинного рассеяния, как и должно быть, ТС описываются линейным законом дисперсии (1.13).

Другой важный предел - сильное междолинное рассеяние, когда $\cos \beta = 0$. Если бы при этом еще отсутствовало междолинное расстояние $2\mathbf{k}_0$ в графене, т.е. $\mathbf{k}_0 = \mathbf{0}$, то мы бы получили в точности спектр ТС для уравнения Дирака (9).

Далее, уже для любых β , если $|k_y| \gg k_{0y}$ то

$$E_s(k_y) \approx s\hbar c^* k_y \sin \gamma, \quad sk_y \cos \gamma \leq 0. \quad (1.25)$$

Т.е. не зависимо от величины междолинного рассеяния на большом удалении по k_y от центров долин ТС ведут себя так, будто есть только однодолинное граничное условие (1.6). При этом, правда, на большом удалении от центра проекций долин происходит выход за пределы применимости метода эффективной массы.

Наконец, при $|k_y + sk_{0y}| \ll |k_{0y}|$, т.е. вблизи проекции дираковских точек

K and K' для любых β и \mathbf{k}_0 электронный спектр ТС имеет вид:

$$E_s = s\hbar c^* \sin \theta (k_y + sk_{0y}), \quad s(k_y + sk_{0y}) \cos \theta < 0, \quad (1.26)$$

где введен новый параметр $\cot \theta/2 = (\cos \beta - \cos \gamma)/\sin \gamma$. Щель в центре зоны Бриллюэна $\Delta = 2|\cos \gamma \sin \beta| \hbar c^* k_{0y}$. Таким образом, учет междолинного рассеяния для линейного края приводит как бы к "перенормировке" параметра a . При этом если ТС существуют, то в низкоэнергетическом приближении всегда представляют собой лучи, выходящие из центров долин. Это позволяет надеяться, что результаты, полученные с однопараметрическим ГУ (1.6) во многих случаях качественно будут описывать и результаты, использующие общее ГУ (1.21). В дальнейшем всюду мы сосредоточимся на простейшем случае однопараметрического ГУ (в отсутствие междолинного рассеяния).

Рассмотрим теперь размерное квантование в полосе графена шириной d в пренебрежении междолинным рассеянием, т.е. с использованием ГУ (1.6). Будем рассматривать края разного типа, т.е. значение граничного параметра на левом и на правом краю полосы разные и равные a_1 и a_2 . Для решений в виде плоских волн $\psi \propto e^{ik_x x + ik_y y}$ получим дисперсионное уравнение, описывающее размерно-квантованный спектр:

$$(1 - a_1 a_2) \frac{E}{\hbar c^*} + s(a_2 - a_1)k_y - (a_1 + a_2)k_x \cot k_x d = 0, \quad (1.27)$$

где $E^2 = \hbar^2 (c^*)^2 (k_y^2 + k_x^2)$. Действительные k_x отвечают размерному квантованию объемного спектра. При $|E| < \hbar c^* |k_y|$, k_x становится мнимым, что отвечает локализованным вблизи краев состояниям. Если $k_y \rightarrow \infty$ эти состояния переходят в ТС для полубесконечного графена с законом дисперсии $E = s\hbar c^* 2a_1 k_y / (1 + a_1^2)$ и $E = s\hbar c^* 2a_2 k_y / (1 + a_2^2)$ на левом и правом краю соответственно. Разумеется, спектр симметричен при замене k_y на $-k_y$, рис. 1.3.

Сравним полученные результаты для полосы с расчетами в рамках модели сильной связи (МСС). $a_1 = 1/a_2 = 0$ соответствует известному результату для

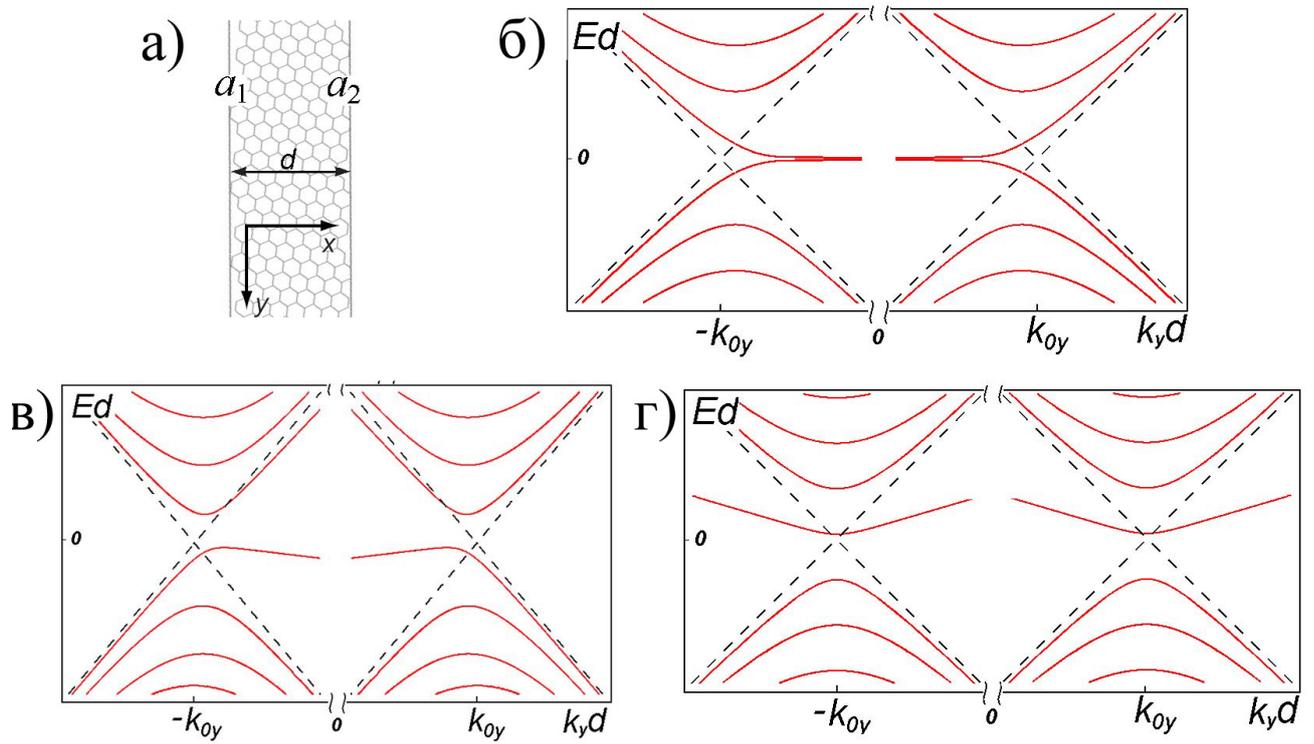


Рис. 1.3. Геометрия (а) и электронный спектр графеновой полосы: б) $a_1 = 1/a_2 = 0$ в) $a_1 = 0.3, a_2 = 20$ г) $a_1 = a_2 = 0.15$. Пунктиром показаны границы объемного спектра $E = c^* \hbar |k_y \pm k_{0y}|$. $2k_{0y}$ — расстояние между долинами в проективной зоне Бриллюэна.

края типа зигзаг [2], рис. 1.3б. При учете следующих за ближайшими соседями МСС дает дисперсионные ТС [61, 62]. В МСС дисперсия ТС зависит от интегралов перекрытия ближайших (t) и следующих за ближайшими соседями (t'). Вблизи уровня Ферми мы можем получить ТС для этого приближения при $a_1 = 1/a_2$ и $a_1 = \pm t'/t$ (при $t' \ll t$). При $a_2 = 1/a_1 = 0$ получаем "бородатый" (bearded or "Klein" edge), а при $a_1 = 1/a_2 = 0$ край типа бухта (cove) в рамках ближайших соседей МСС [59, 108]. Бородатый край в приближении следующих за ближайшими соседями МСС [109] получается при $-a_2 = 1/a_1 \approx 2t'/t$.

Для полосы с одинаковыми краями, например, типа зигзаг, следует ожидать, что $a_1 = a_2$ и, значит, спектр должен быть симметричным не только относительно центра зоны Бриллюэна, но и относительно каждой из долин.

На краевые атомы углерода могут осаждаться и другие химические элементы, изменяя свойства края [69]. Мы можем получить подобные спектры ТС если не учитывать состояния, локализованные на пассивированных атомах.

1.3. Электронный спектр полуплоскости и полосы в магнитном поле

Обсудим теперь влияние магнитного поля на ТС в графене. Начнем с простейшей геометрии и рассмотрим полуплоскость графена $z = 0, x > 0$ в пренебрежении междолинным рассеянием на краю. Магнитное поле включается в гамильтониан (1.2) стандартной подстановкой $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} + e\mathbf{A}/c$, где e — заряд электрона. При этом будем считать, что ГУ обусловлено сильными атомными потенциалами, так что магнитное поле, которое можно получить на постоянных магнитах в лабораториях, не влияет на параметр a . Направим ось z против магнитного поля и выберем следующую калибровку векторного потенциала: $\mathbf{A} = (0, -Bx, 0)$. Уравнение, описывающее долину $s = +1$ (на рисунках

будем изображать ее красным цветом) в магнитном поле, имеет вид:

$$c^* \begin{pmatrix} 0 & -i\hbar \frac{d}{dx} - i \left(\hbar k_y - \frac{eBx}{c} \right) \\ -i\hbar \frac{d}{dx} + i \left(\hbar k_y - \frac{eBx}{c} \right) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}. \quad (1.28)$$

Здесь k_y — сохраняющийся волновой вектор вдоль границы раздела. Выражая из нижнего уравнения ψ_2 и подставляя в верхнее получаем уравнение на ψ_1 :

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} - \frac{eB}{\hbar c} + \left(k_y - \frac{eBx}{\hbar c} \right)^2 \right] \psi_1 = \left(\frac{E}{\hbar c^*} \right)^2 \psi_1, \quad (1.29)$$

с ГУ:

$$\left[1 + \frac{a\hbar c^*}{E} \left(\frac{d}{dx} - k_y \right) \right] \psi_1|_{x=0} = 0. \quad (1.30)$$

Сделаем в этом уравнении и ГУ замену переменных

$$t = \sqrt{2} \left(\frac{x}{\lambda} - \lambda k_y \right), \quad \lambda = \sqrt{\frac{c}{eB}}, \quad (1.31)$$

λ — магнитная длина, и вводя безразмерную энергию ε и безразмерный импульс, играющий роль безразмерного центра осциллятора X_0 :

$$\varepsilon = \frac{\lambda E}{\hbar c^*}, \quad X_0 = \lambda k_y, \quad (1.32)$$

получим хорошо известное уравнение Вебера [110], описывающее, например, гармонический осциллятор в квантовой механике:

$$\left[\frac{d^2}{dt^2} - \left(\frac{t^2}{4} - \frac{\varepsilon^2 + 1}{2} \right) \right] \psi_1(t) = 0, \quad (1.33)$$

с преобразованным ГУ:

$$\left[1 + \frac{a}{\varepsilon} \left(\sqrt{2} \frac{d}{dt} - X_0 \right) \right] \psi_1(t)|_{t=-\sqrt{2}X_0} = 0. \quad (1.34)$$

Общее решение (1.33) можно записать в виде линейной комбинации функций параболического цилиндра $U(b, x)$ и $V(b, x)$ [96], где $b = -(\varepsilon^2 + 1)/2$. Функция $U(b, x)$ быстро убывает при $x \rightarrow \infty$ с асимптотикой:

$$U(b, x) \sim e^{-x^2/4} x^{-b-1/2} \left[1 - \frac{(b+1/2)(b+3/2)}{2x^2} + \dots \right], \quad (1.35)$$

и имеет следующее полезное свойство:

$$\frac{d}{dx}U(b, x) + \frac{x}{2}U(b, x) + \left(b + \frac{1}{2}\right)U(b + 1, x) = 0. \quad (1.36)$$

Функция $V(b, x)$ растет при $x \rightarrow \infty$ с асимптотикой

$$V(b, x) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{x^2/4} x^{b-1/2} \left[1 + \frac{(b-1/2)(b-3/2)}{2x^2} + \dots \right] \quad (1.37)$$

и имеет похожее полезное свойство:

$$\frac{d}{dx}V(b, x) + \frac{x}{2}V(b, x) - V(b + 1, x) = 0. \quad (1.38)$$

На полуплоскости $x > 0$ в качестве решений (1.33) выбираем функцию $U(b, x)$, т.к. только она отвечает конечности волновой функции всюду. Подставляя это решение в преобразованное ГУ и используя указанное выше полезное свойство, находим неявное уравнение, определяющее электронный спектр $\varepsilon(X_0)$:

$$U\left(-\frac{\varepsilon^2 + 1}{2}, -\sqrt{2}X_0\right) + \frac{a\varepsilon}{\sqrt{2}}U\left(-\frac{\varepsilon^2 - 1}{2}, -\sqrt{2}X_0\right) = 0 \quad (1.39)$$

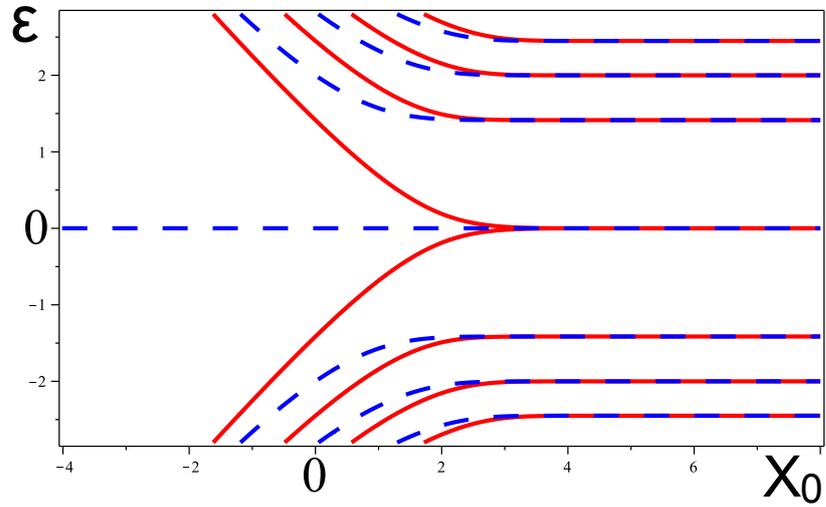
Решение в долине $s = -1$ (ей будет отвечать синий цвет) находится аналогично. Исходные уравнения и ГУ для этой долины отличается заменой $E \rightarrow -E \Rightarrow \varepsilon \rightarrow -\varepsilon$ и $a \rightarrow 1/a$, поэтому для неявного уравнения на $\varepsilon(X_0)$ в долине $s = -1$ получаем:

$$U\left(-\frac{\varepsilon^2 + 1}{2}, -\sqrt{2}X_0\right) - \frac{\varepsilon}{\sqrt{2}a}U\left(-\frac{\varepsilon^2 - 1}{2}, -\sqrt{2}X_0\right) = 0. \quad (1.40)$$

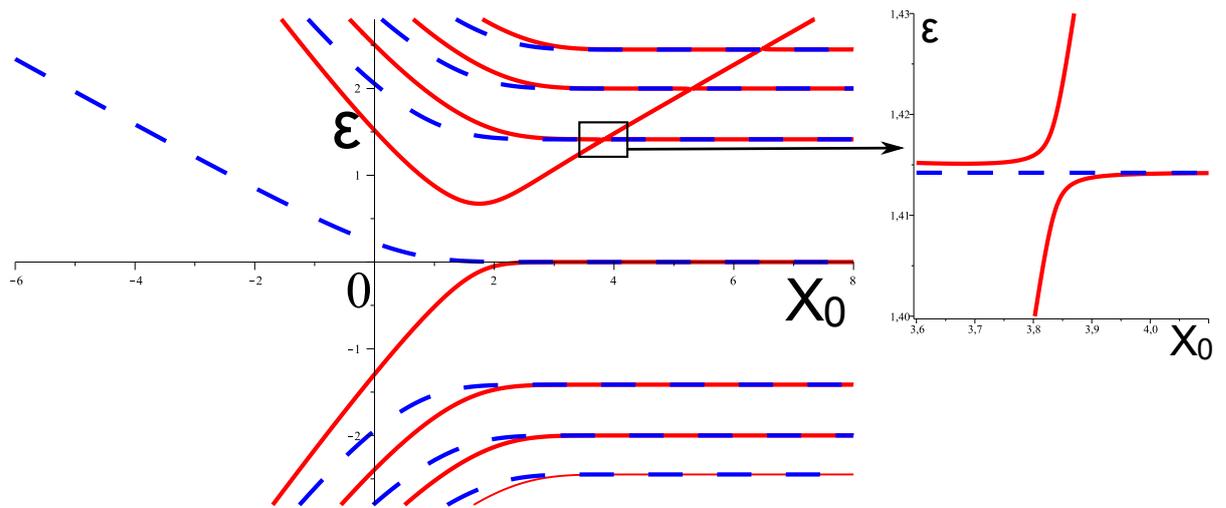
Электронный спектр $\varepsilon(X_0)$ обеих долин, найденный численным решением этого уравнения и уравнения (1.39) с помощью математического пакета MAPLE, представлен на рис. 1.4. При $a = 0$ получается хорошо известный спектр полуплоскости графена с границей типа зигзаг [75, 111–113].

Проанализируем полученный спектр. При $X_0 \rightarrow +\infty$ спектр (при конечных энергиях) становится бездисперсионным, что отвечает «объемным» уровням Ландау с энергией $\varepsilon_n^2 = 2n$, n — любое целое число большее нуля, и волновой функцией:

$$\psi_1(x) \propto e^{-(x-X_0)^2/2} H_n(x - X_0). \quad (1.41)$$



(a)



(б)

Рис. 1.4. Электронный спектр $\varepsilon(X_0)$ для полуплоскости $x > 0$ графена в магнитном поле при (а) $a = 0$ (вверху) и (б) $a = 0.2$ (внизу). $X_0 = \lambda k_y$ — центр осциллятора, λ — магнитная длина. Сплошные (красные) кривые соответствуют долине $s = +1$, пунктирные (синие) — долине $s = -1$. Проекции центров долин совмещены.

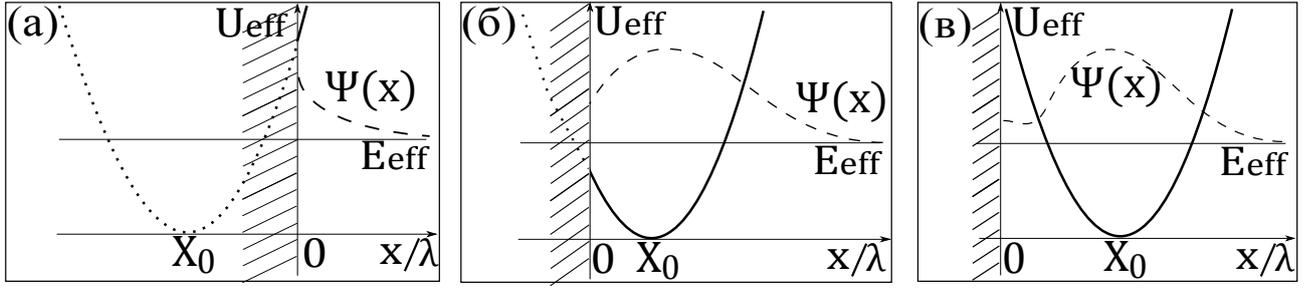


Рис. 1.5. Схематически показано поведение волновой функции (пунктиром) и эффективного параболического потенциала (сплошная кривая в области $x > 0$ и точечная при $x < 0$) вблизи края $x = 0$. Уровень эффективной энергии $E_{eff} = (\varepsilon^2 + 1)/2$ показан тонкой горизонтальной прямой. В случае (а) движение чисто подбарьерное и соответствует таммовским состояниям. Случай (б) отвечает скачущим орбитам (при не очень больших X_0) или уровням Ландау (при больших положительных X_0). Случай (в) отвечает «интерференции» таммовских состояний с объемными уровнями Ландау.

$H_n(x)$ — полиномы Эрмита. Т.е. при удалении центра осциллятора X_0 от края электроны перестают «чувствовать» край. Такая же ситуация возникает и для электронов с параболическим законом дисперсии [114]. При приближении центра осциллятора к краю уровни Ландау становятся дисперсионными, что на классическом языке соответствует появлению скачущих орбит. Нетрудно получить, что для таких решений $\varepsilon \rightarrow \pm X_0$ при $X_0 \rightarrow -\infty$. Однако, в отличие от «классической» картины [114], как видно из рис. 1.4 в поведении нулевого уровня Ландау появляется существенное отличие. Для объяснения и анализа такого поведения применим квазиклассическое приближение.

Уравнение (1.33) можно рассматривать как одномерное уравнение Шредингера с эффективной потенциальной энергией $U_{eff} = t^2/4$ и эффективной полной энергией $E_{eff} = (\varepsilon^2 + 1)/2$. На таком квазиклассическом языке асимптотика $\varepsilon \rightarrow \pm X_0$ соответствует **надбарьерному** движению (ее легко получить, например, заменяя параболический барьер треугольной ямой). Но в рассматриваемом нами случае в графене без магнитного поля есть ТС, которые и в магнитном поле могут частично или полностью отвечать **подбарьерному** движению. Например, при отрицательных X_0 нужно учесть «экспоненциально» па-

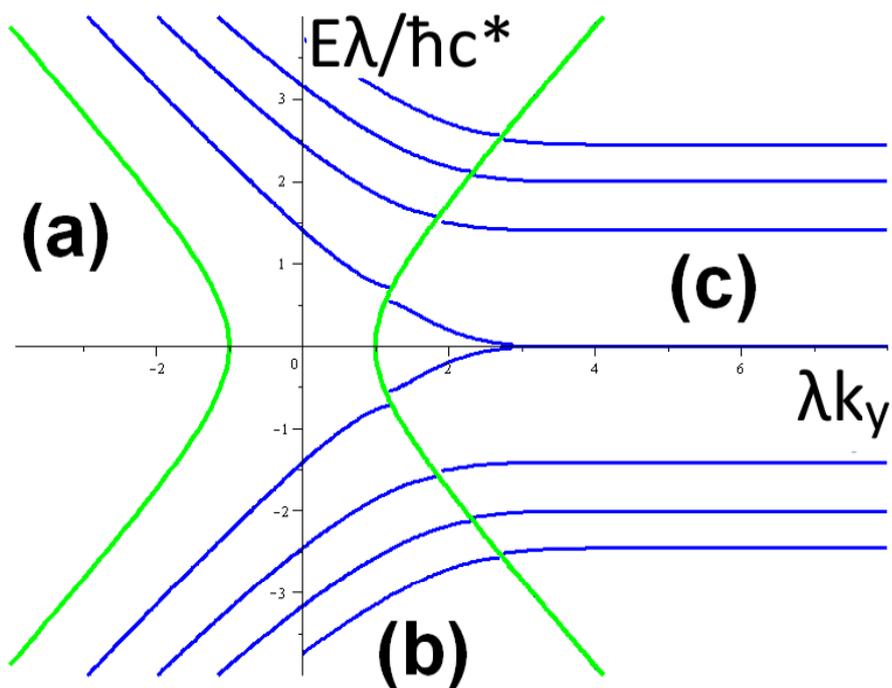


Рис. 1.6. Квазиклассический электронный спектр $\varepsilon(\lambda k_y)$ в «красной» долине ($s = -1$) при $a = 0$. Желтые кривые делят спектр на три области: (а) область чисто подбарьерного движения (б) скачущие орбиты (с) сосуществования магнитных таммовских уровней и уровней Ландау.

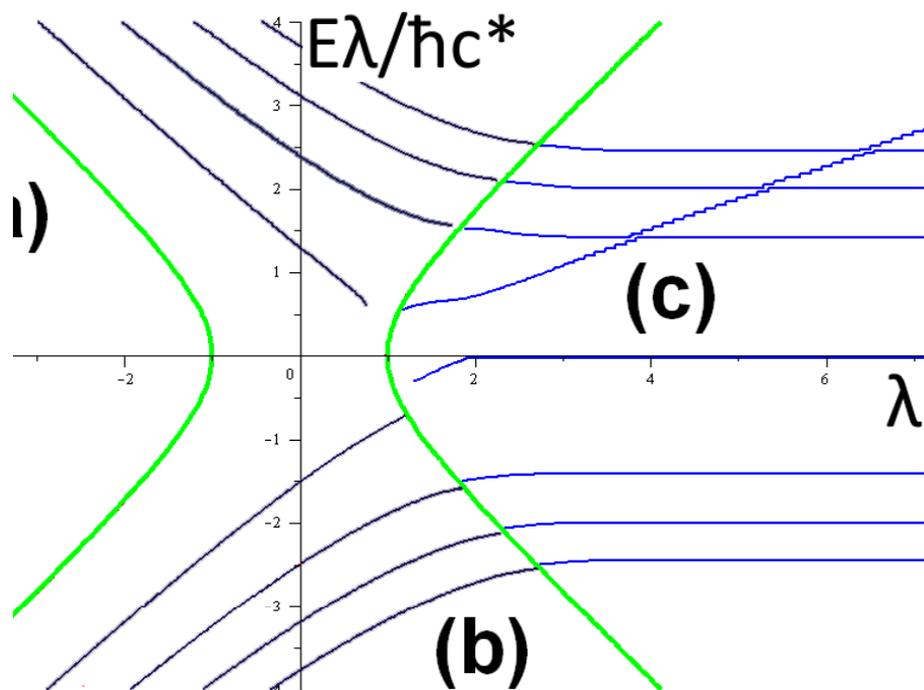


Рис. 1.7. Квазиклассический электронный спектр $\varepsilon(\lambda k_y)$ в «красной» долине ($s = -1$) при $a = 0.2$. Желтые кривые делят спектр на три области: (б) область чисто подбарьерного движения (б) скачущие орбиты (с) сосуществования магнитных таммовских уровней и уровней Ландау.

дающее квазиклассическое решение, отвечающее таким «магнитным» ТС (см. рис. 1.5а):

$$\psi(t) \propto \exp \left(- \int^t \sqrt{\frac{x^2}{4} - \frac{\varepsilon^2 + 1}{2}} dx \right). \quad (1.42)$$

Подставляя его в ГУ получим уравнение, определяющее спектр таких состояний:

$$1 - sa^s \frac{X_0}{\varepsilon} - sa^s \frac{\sqrt{X_0^2 - \varepsilon^2 - 1}}{\varepsilon} = 0. \quad (1.43)$$

Из которого при достаточно больших отрицательных X_0 и $|a| < 1$ в случае $s = -1$ (синяя долина) получаем спектр:

$$\varepsilon \approx -\frac{2a}{1+a^2} X_0. \quad (1.44)$$

Это решение в точности соответствует ТС (1.13) без магнитного поля! Это не так уж и удивительно, т.к. в слабом магнитном поле при глубине локализации ТС меньше магнитной длины ТС практически не «чувствуют» магнитного поля. Именно так ведет себя нулевой уровень Ландау при достаточно больших отрицательных X_0 в синей долине, рис. 1.4.

В красной долине ($s = +1$) с подобным решением, которое для $|a| < 1$ возникает при $X_0 > 0$ нужно поступить аккуратнее, т.к. в этом случае магнитные ТС сосуществуют с объемными уровнями Ландау, рис. 1.5в. Значит, необходимо сшивать экспоненциально падающее вблизи стенки подбарьерное решение с осциллирующими надбарьерными (и снова падающими при очень больших X_0). Проделав описанную процедуру, можно получить уравнение, определяющее спектр таких смешанных состояний:

$$\left(n - \frac{\varepsilon^2 + 1}{2} \right) \pi = \arctan \left(\frac{2i_1 i_2}{i_3} \right), \quad (1.45)$$

где

$$i_1 = \exp \left\{ \frac{4}{3} \sqrt[4]{\frac{\varepsilon^2 + 1}{2}} \sqrt{\left[\sqrt{2}X_0 - \sqrt{2(\varepsilon^2 + 1)} \right]^3} \right\} \quad (1.46)$$

$$i_2 = \varepsilon - aX_0 - \sqrt{2}a \sqrt[4]{\frac{\varepsilon^2 + 1}{2}} \sqrt{\sqrt{2}X_0 - \sqrt{2(\varepsilon^2 + 1)}} \quad (1.47)$$

$$i_3 = \varepsilon - aX_0 + \sqrt{2}a \sqrt[4]{\frac{\varepsilon^2 + 1}{2}} \sqrt{\sqrt{2}X_0 - \sqrt{2(\varepsilon^2 + 1)}}. \quad (1.48)$$

Это уравнение описывает «интерференцию» таммовских уровней с уровнями Ландау. Спектр для $a = 0$ и $a = 0.2$ и $n = 1, 2, 3, 4$, найденный с помощью пакета MAPLE, показан на 1.6 и 1.7. Состояния вблизи прямой

$$\varepsilon = \frac{2a}{1 + a^2} X_0 \quad (1.49)$$

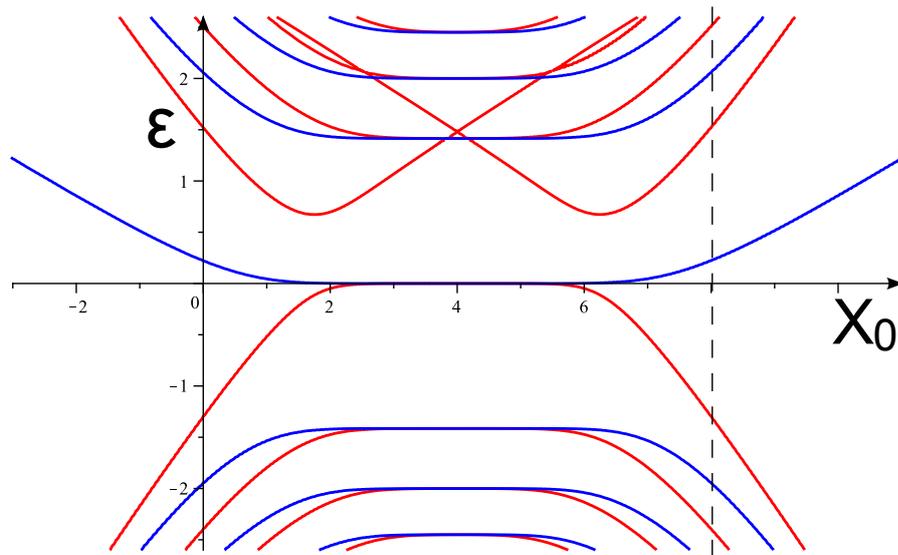
соответствуют магнитным таммовским состояниям, энергия которых расположена под барьером, а волновая функция «экспоненциально» локализована вблизи края, поэтому для получения их спектра можно было сразу оставить только одну падающую (от края) экспоненту, подобно тому как это было сделано выше для долины $s = -1$. Тогда мы сразу получили бы выражение 1.49.

При движении по X_0 вправо спектр при каждом n непрерывно переходит к уровням Ландау $\varepsilon = \sqrt{2n}$. Это происходит когда энергии таммовских состояний (при некоторых X_0) сравниваются с энергиями объемных уровней Ландау. Величину расщепления (антикроссинга) уровней Ландау и магнитных ТС можно найти по теории возмущений.

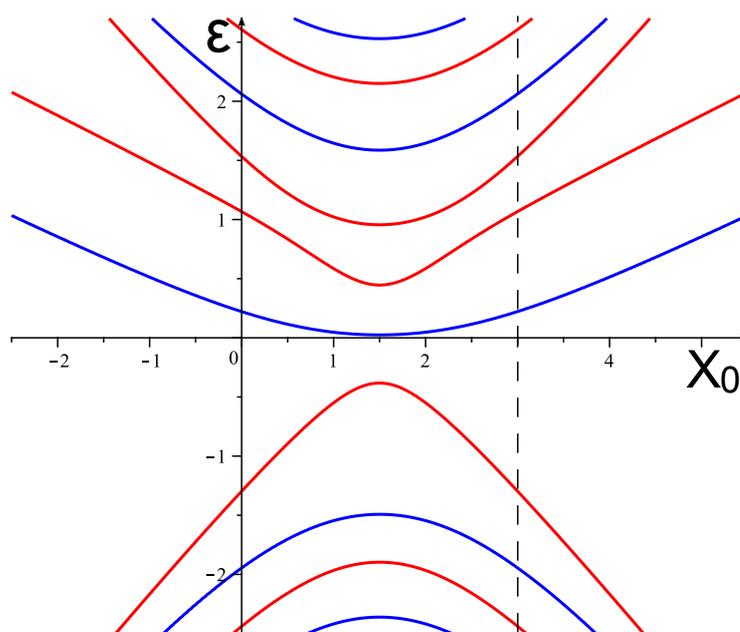
Аналитическое выражение для поведения нулевого уровня Ландау $\varepsilon(X_0)$ при больших положительных X_0 проще получить из точного дисперсионного уравнения. Для этого воспользуемся следующей асимптотикой функции $U(b, t)$ при $t < 0$ и $|\varepsilon| \ll 1$ [110, 115]:

$$U(b, t) = \exp \left(-\frac{t^2}{4} \right) - \sqrt{2\pi} \frac{2b + 1}{2t} \exp \left(\frac{t^2}{4} \right), \quad b = -\frac{1 + \varepsilon^2}{2}. \quad (1.50)$$

Подставляя эту асимптотику в дисперсионное уравнение (1.39), получим урав-



(a)



(б)

Рис. 1.8. Электронный спектр ленты из графена, края которой характеризуются постоянными граничными параметрами в отсутствие междолинного рассеяния $a_1 = a_2 = 0.2$, для разной ширины ленты d : (а) $d = 8\lambda$, (б) $d = 3\lambda$. λ — магнитная длина. Цветами показаны разные долины. Вертикальная пунктирная прямая соответствует правой границе ленты. Центры долин совмещены.

нение, определяющее низкоэнергетический спектр:

$$\varepsilon^2 - sa^s \left(2X_0 - \frac{1}{X_0} \right) \varepsilon - \frac{2X_0}{\sqrt{\pi}} \exp(-X_0^2) = 0, \quad (1.51)$$

решения которого при $|X_0| \gg 1$:

$$\varepsilon_s(X_0) = s \frac{a^s}{\sqrt{\pi}} e^{-X_0^2}. \quad (1.52)$$

На этом мы закончим описание электронного спектра графеновой плоскости в магнитном поле и приведем еще спектр в магнитном поле для графеновой полосы (ленты) ширины d с краями, характеризуемыми различными граничными параметрами a_1 и a_2 , которые будем считать постоянными на границе. Волновые функции - решения уравнения (1.33) - в этом случае должны содержать линейную комбинацию функций параболического цилиндра $U(b, t)$ и $V(b, t)$. Подставляя ее в ГУ нетрудно получить дисперсионное уравнение, описывающее электронный спектр графеновой полосы. Например, для красной ($s = +1$) долины он имеет вид:

$$\begin{aligned} & \left\{ U \left[-\frac{\varepsilon^2 + 1}{2}, -\sqrt{2}X_0 \right] + \frac{\sqrt{2}a_1\varepsilon}{2} U \left[\frac{1 - \varepsilon^2}{2}, -\sqrt{2}X_0 \right] \right\} \times \\ & \times \left\{ V \left[-\frac{\varepsilon^2 + 1}{2}, -\sqrt{2} \left(X_0 - \frac{d}{\lambda} \right) \right] - \frac{\sqrt{2}a_2}{\varepsilon} V \left[\frac{1 - \varepsilon^2}{2}, -\sqrt{2} \left(X_0 - \frac{d}{\lambda} \right) \right] \right\} = \\ & = \left\{ V \left[-\frac{\varepsilon^2 + 1}{2}, -\sqrt{2}X_0 \right] + \frac{\sqrt{2}a_1\varepsilon}{2} V \left[\frac{1 - \varepsilon^2}{2}, -\sqrt{2}X_0 \right] \right\} \times \\ & \times \left\{ U \left[-\frac{\varepsilon^2 + 1}{2}, -\sqrt{2} \left(X_0 - \frac{d}{\lambda} \right) \right] - \frac{\sqrt{2}a_2}{\varepsilon} U \left[\frac{1 - \varepsilon^2}{2}, -\sqrt{2} \left(X_0 - \frac{d}{\lambda} \right) \right] \right\} \quad (1.53) \end{aligned}$$

Спектр при $a_1 = a_2 = 0.2$ для полосы шириной $d = 8\lambda$ (когда гибридизация ТС от разных краев слабая) и $d = 3\lambda$ (когда гибридизация сильная) представлен на рис. 1.8.

1.4. Электронный спектр квантовой точки и антиточки без магнитного поля

Перейдем от линейной геометрии к круговой и найдем электронный спектр квантовой точки радиусом R_0 . Для этого в уравнениях (1.2) перейдем к полярным координатам (r, ϕ) стандартной заменой:

$$x = r \cos \phi, \quad y = r \sin \phi. \quad (1.54)$$

Нетрудно получить следующее уравнение для 1-й компоненты волновой функции:

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \psi_1 = E^2 \psi_1. \quad (1.55)$$

Здесь снова считается $\hbar = c^* = 1$ и, кроме того, $E \neq 0$. Будем считать, что на границе отсутствует междолинное рассеяние и параметр a , входящий в ГУ (1.6), постоянен на границе. Тогда у электронов в графене сохраняется полный момент j , а для компоненты волновой функции ψ_1 вообще можно считать, что сохраняется орбитальный момент $l = j - 1/2 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Выбирая решение $\psi_1 \propto \exp(il\phi)$ и вводя новую безразмерную переменную $z = Er$ ($E \neq 0$) уравнение (1.55) можно свести к уравнению Бесселя:

$$z^2 \psi_1''(z) + z \psi_1'(z) + (z^2 - l^2) \psi_1 = 0. \quad (1.56)$$

Из-за конечности волновой функции в нуле выбираем решение этого уравнения в виде функции Бесселя первого рода $J_l(z)$.

В полярных координатах граничное условие на волновую функцию ψ_1 имеет вид (ГУ для волновой функции ψ_3 , как обычно, легко получить заменой $E \rightarrow -E$, $a \rightarrow 1/a$):

$$\left(\frac{E}{a} - \frac{l}{R_0} + \frac{d}{dr} \right) \psi_1 \Big|_{r=R_0} = 0. \quad (1.57)$$

Подставляя сюда решение в виде функции Бесселя и используя их свойство [96]:

$$J'_l(z) = -J_{l+1}(z) + \frac{l}{z}J_l(z), \quad (1.58)$$

найдем уравнение, определяющее электронный спектр квантовой точки. Для определенности рассмотрим долину $s = +1$ при $E > 0$. Тогда спектр имеет вид:

$$J_l(ER_0) = aJ_{l+1}(ER_0). \quad (1.59)$$

Как обычно, спектр представляет из себя набор дискретных уровней. При $a = 0$ спектр определяется нулями функции Бесселя и соответствует границе типа зигзаг (если бы, конечно, такой зигзаг можно было бы создать по всему периоду квантовой точки). При $a \neq 0$ в низкоэнергетическом приближении раскладывая функции Бесселя в ряд нетрудно найти спектр:

$$E_l \approx \frac{2(l+1)\hbar c^*}{aR_0} \quad (1.60)$$

Бесконечный лист графена с круглым отверстием (антиточка) радиусом R_0 была рассмотрена в работах В.В. Еналдиева [116]. Было показано, что найти стационарные, локализованные вблизи границы антиточки решения, отвечающие ТС, в этом случае нельзя. Однако, можно найти квазистационарные состояния, для которых энергия является комплексной величиной $E = E' + iE''$ с малой мнимой частью E'' . Подобно задаче об альфа-распаде [117] E'' можно трактовать, как величину, связанную с временем распада из состояния с энергией E' . Для простоты рассмотрим положительные энергии $E' > 0$ и $a > 0$. Для такого состояния волновая функция в $s = +1$ долине имеет вид:

$$\begin{pmatrix} \psi_1(r, \phi) \\ \psi_2(r, \phi) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_1 e^{i\phi} H_l^{(1)}(Er) \\ C_2 e^{i(l+1)\phi} H_{l+1}^{(1)}(Er) \end{pmatrix}, \quad (1.61)$$

где $l = j - 1/2$ — целое число, $H_l^{(1)}$ — функция Ганкеля 1-го рода, имеющая на $+\infty$ асимптотику:

$$H_l^{(1)}(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \exp\left(iz - \frac{il\pi}{2} - \frac{i\pi}{4}\right), \quad -\pi < \arg z < \pi. \quad (1.62)$$

С учетом временного множителя e^{-iEt} эта функция отвечает уходящей на бесконечность по r электронной волне. В случае отрицательных энергий $E' < 0$ нужно было бы выбрать функцию Ганкеля 2-го рода. Подставляя волновую функцию в ГУ найдем дисперсионное уравнение

$$H_l^{(1)}(ER_0) = aH_{l+1}^{(1)}(ER_0). \quad (1.63)$$

Если $ER_0 \ll 1$, то оставляя в асимптотике функции Ганкеля один (главный) мнимый член и один (самый маленький) действительный член [96]:

$$H_l^{(1)}(z) \sim \frac{1}{l!} \left(\frac{z}{2}\right)^l - \frac{i}{\pi} \left(\frac{z}{2}\right)^{-1} (l-1)!, \quad (1.64)$$

найдем спектр квазистационарных состояний в долине $s = +1$:

$$ER_0 \approx 2la - i \frac{2\pi a (la)^{2l}}{((l-1)!)^2}, \quad la > 0, \quad la \ll 1/2. \quad (1.65)$$

Этот спектр можно получить из спектра ТС на полуплоскости (1.13) квазиклассическим квантованием волнового числа $k_y = l/R_0$ при малых a .

1.5. Электронный спектр квантовой антиточки в магнитном поле

Рассмотрим теперь антиточку в магнитном поле B направленном вдоль отрицательного направления оси z без учета междолинного рассеяния. Векторный потенциал выберем в следующей калибровке:

$$\mathbf{A} = \left(\frac{By}{2}, -\frac{Bx}{2}, 0 \right). \quad (1.66)$$

Снова положим $\hbar = c^* = 1$. В полярных координатах (r, ϕ) получим уравнение на первую компоненту волновой функции

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{e^2 B^2}{4c^2} r^2 + \frac{eB}{c} \left(i \frac{\partial}{\partial \phi} - 1 \right) \right] \psi_1 = E^2 \psi_1, \quad (1.67)$$

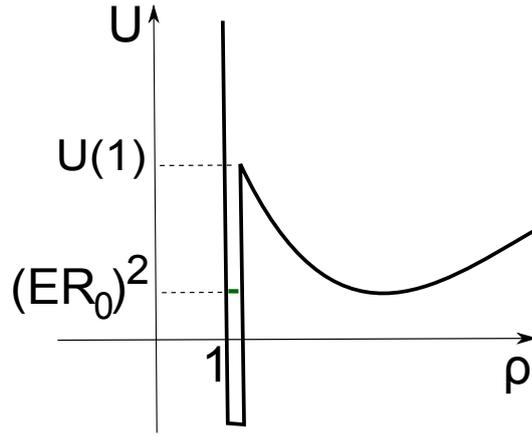


Рис. 1.9. Эффективная потенциальная энергия в которой движется электрон в антиточке.

и ГУ:

$$\left[1 + \frac{a}{ER_0} \left(\frac{eBR_0^2}{2c} + i \frac{\partial}{\partial \phi} \right) + \frac{a}{E} \frac{\partial}{\partial r} \right] \psi_1|_{r=R_0} = 0. \quad (1.68)$$

Введем безразмерные переменные $\rho = r/R_0$, $\Phi/\Phi_0 = eBR_0^2/2c$, где Φ — поток магнитного поля через площадь отверстия антиточки (радиусом R_0), $\Phi_0 = hc/e$ — квант магнитного потока. Считая параметр ГУ a постоянным вдоль границы, получим уравнение с ГУ:

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{l^2}{\rho^2} + \frac{\Phi^2}{\Phi_0^2} \rho^2 - \frac{2\Phi}{\Phi_0} (l+1) \right] \psi_1 = (ER_0)^2 \psi_1 \quad (1.69)$$

$$\left(1 + \frac{a}{ER_0} \left(\frac{\Phi}{\Phi_0} - l \right) + \frac{a}{ER_0} \frac{\partial}{\partial \rho} \right) \psi_1|_{\rho=1} = 0. \quad (1.70)$$

Переходя к новой функции $\chi(\rho) = \sqrt{\rho} \psi(\rho)$ приведем это уравнение к виду эффективного уравнения Шредингера:

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{l^2 - 1/4}{\rho^2} + \frac{\Phi^2}{\Phi_0^2} \rho^2 - \frac{2\Phi}{\Phi_0} (l+1) \right) \chi_1 = (ER_0)^2 \chi_1, \quad (1.71)$$

с ГУ

$$\left(1 + \frac{a}{ER_0} \left(\frac{\Phi}{\Phi_0} - l \right) + \frac{a}{ER_0} \left(\frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{2} \right) \right) \chi_1|_{\rho=1} = 0. \quad (1.72)$$

Роль эффективной энергии играет величина $(ER_0)^2$, а эффективной потенци-

альной энергии -

$$\begin{aligned}
 U(\rho) &= \frac{l^2 - 1/4}{\rho^2} + \frac{\Phi^2}{\Phi_0^2} \rho^2 - \frac{2\Phi}{\Phi_0} (l + 1) = \\
 &= \left(\frac{\sqrt{l^2 - 1/4}}{\rho} - \left| \frac{\Phi}{\Phi_0} \right| \rho \right)^2 + 2 \left| \frac{\Phi}{\Phi_0} \right| \sqrt{l^2 - 1/4} - 2 \frac{\Phi}{\Phi_0} (l + 1), \quad (1.73)
 \end{aligned}$$

График $U(\rho)$ изображен на рис. 1.9. Для анализа решений снова можно воспользоваться квазиклассическим приближением. Для этого заметим, что как и при обсуждении электронного спектра графеновой полуплоскости в магнитном поле, возможны три случая:

1. все точки поворота, определяемые уравнением $(ER)^2 = U(\rho)$, расположены справа от точки $\rho = 1$ или точки поворота отсутствуют вовсе, тогда волновая функция отвечает чисто подбарьерному движению, что должно отвечать ТС, модифицированным магнитным полем;
2. правая точка поворота, ρ_2 , находится справа от $\rho = 1$, левая точка поворота, ρ_1 - слева (при $l = 0$ левая точка поворота отсутствует), в этом случае волновая функция сначала осциллирует вблизи границы, а потом экспоненциально спадает при $\rho \rightarrow \infty$, что отвечает скачущим орбитам;
3. левая точка поворота находится правее $\rho = 1$, что отвечает интерференции ТС и объемных уровней Ландау.

Рассмотрим эти случаи последовательно, начиная с решения, отвечающему ТС, когда эффективная энергия $(ER_0)^2$ лежит в классически запрещенной области (под барьером). Волновая функция в этом случае представляет собой падающую экспоненту:

$$\chi(\rho) = \frac{C}{\sqrt{|p(\rho)|}} e^{-\int |p(\rho)| d\rho}, \quad (1.74)$$

где введен квазиклассический импульс (комплексный в случае подбарьерного движения):

$$p(\rho) = \sqrt{(ER_0)^2 - U(\rho)}, \quad (1.75)$$

Подставив эту волновую функцию в граничное условие найдем:

$$p(1) \left(1 - \frac{1}{p(1)^2} \frac{\partial p}{\partial \rho}(1) \right) = \frac{ER_0}{a} + \left(\frac{\Phi}{\Phi_0} - l \right) - \frac{1}{2}. \quad (1.76)$$

Заметим, что в области применимости квазиклассики второй член в скобочке в левой части этого уравнения можно считать малым. Подставляя в это уравнение $p(1)$, приходим к уравнению:

$$\sqrt{\left(\frac{\Phi}{\Phi_0} - l \right)^2 - \frac{2\Phi}{\Phi_0} - 1/4 - (ER_0)^2 \left(1 + \frac{1}{2U(1)^{1.5}} \left(\frac{\Phi^2}{\Phi_0^2} - l^2 + \frac{1}{4} \right) \right)} = \frac{ER_0}{a} + \left(\frac{\Phi}{\Phi_0} - l \right) - \frac{1}{2}. \quad (1.77)$$

В области применимости квазиклассического приближения при $(\Phi/\Phi_0 - l - 1/2)^2 \gg (1 + a^2) |\Phi/\Phi_0 + l + 1/2|$ (т.е., например, при больших $|l|$) существует решение

$$ER_0 = \frac{2as}{1 + a^2} \left(l + \frac{1}{2} - \frac{\Phi}{\Phi_0} \right), \quad s(1 - a^2) \left(l + \frac{1}{2} - \frac{\Phi}{\Phi_0} \right) > 0. \quad (1.78)$$

В этом уравнении уже учтена вторая долина. Это решение напоминает спектр краевых состояний для полуплоскости 1.13, только в нем импульс вдоль границу заменился на "размерно-квантованный" (периметрически) $k_y \rightarrow l/R$ и добавлен магнитный поток, который при больших l , когда волновая функция сильно прижата к радиусу дырки, влияет в основном только на ее фазу. Также как и с подобным спектром для полуплоскости, нужно поступать аккуратнее в том случае, если происходит пересечение с уровнями Ландау (3-й случай).

Теперь рассмотрим второй случай, когда правая точка поворота

$$\rho_2^2 = \frac{(ER)^2 + 2\frac{\Phi}{\Phi_0}(l+1) + \sqrt{\left((ER)^2 + 2\frac{\Phi}{\Phi_0}(l+1) \right)^2 - (4l^2 - 1)\frac{\Phi}{\Phi_0}}}{2\frac{\Phi^2}{\Phi_0^2}} > 1, \quad (1.79)$$

а левая точка поворота (при $l \neq 0$)

$$\rho_1^2 = \frac{(ER)^2 + 2\frac{\Phi}{\Phi_0}(l+1) + \sqrt{\left((ER)^2 + 2\frac{\Phi}{\Phi_0}(l+1) \right)^2 - (4l^2 - 1)\frac{\Phi}{\Phi_0}}}{2\frac{\Phi^2}{\Phi_0^2}} < 1 \quad (1.80)$$

Квазиклассическая волновая функция в этом случае при $1 < \rho < \rho_2$

$$\chi_1(\rho) = \frac{C}{\sqrt{p(\rho)}} \cos \left(\int_{\rho_2}^{\rho} p(\rho) d\rho + \frac{\pi}{4} \right) \quad (1.81)$$

Подставляя ее в ГУ находим дисперсионное уравнение:

$$\tan \left(\frac{\pi}{4} - \int_1^{\rho_2} p(\rho) d\rho \right) = \frac{1}{p(1)} \left(\frac{ER}{a} + \frac{\Phi}{\Phi_0} - l - \frac{1}{2} - \frac{p'(1)}{2p(1)} \right) \quad (1.82)$$

Прежде чем двигаться дальше проведем несколько технических вычислений. Нам потребуются интегралы вида:

$$\int_1^{\rho_2} p(\rho) d\rho = \int_1^{\rho_2} \sqrt{\frac{1}{4} - l^2 + \left((ER)^2 + \frac{2\Phi}{\Phi_0}(l+1) \right) \rho^2 - \frac{\Phi^2}{\Phi_0^2} \rho^4} \frac{d\rho}{\rho} \quad (1.83)$$

Которые удобно брать переходя к переменной интегрирования $x = \rho^2$.

$$\int p(\rho) d\rho = \frac{1}{2} \int \frac{\sqrt{R}}{x} dx; \quad R = a + bx + cx^2, \quad (1.84)$$

где

$$a = \frac{1}{4} - l^2, \quad b = (ER)^2 + \frac{2\Phi}{\Phi_0}(l+1), \quad c = -\frac{\Phi^2}{\Phi_0^2}. \quad (1.85)$$

Здесь мы временно ввели обозначение a которые не стоит путать с параметром ГУ a !

Это табличный интеграл, см. формулу (2.267) на стр. 98 в [118]:

$$\int p(\rho) d\rho = \frac{1}{2} \left(\sqrt{R} + a \int \frac{dx}{x\sqrt{R}} + \frac{b}{2} \int \frac{dx}{\sqrt{R}} \right) \quad (1.86)$$

Однако, дальнейшее его вычисление зависит от знака $a = 1/4 - l^2$.

Случай $l = 0$

Рассмотрим уровень $l = 0$ отдельно, т.к в этом случае поведение эффективного потенциала при $\rho \rightarrow 0$ отличается от остальных l . Это проявляется в том, что коэффициент $a = 1/4 > 0$. Для того чтобы ρ_2 существовал дискриминант должен быть $b^2 - 4ac > 0$. Имеем:

$$\int p(\rho)d\rho = \frac{1}{2} \left[\sqrt{R} - \frac{1}{2} \ln \left(\frac{\frac{1}{2} + b\rho^2 + \sqrt{R}}{\rho^2} \right) - \frac{b\Phi_0}{2|\Phi|} \arcsin \left(\frac{b - 2\frac{\Phi^2}{\Phi_0^2}\rho^2}{\sqrt{\frac{\Phi^2}{\Phi_0^2} + b^2}} \right) \right] \quad (1.87)$$

Откуда находим:

$$\begin{aligned} \int_1^{\rho_2} p(\rho)d\rho = & \frac{1}{2} \left\{ \sqrt{\frac{1}{4} + b\rho_2^2 - \frac{\Phi^2}{\Phi_0^2}\rho_2^4} - \sqrt{\frac{1}{4} + b - \frac{\Phi^2}{\Phi_0^2}} - \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1}{\rho_2^2} \frac{\frac{1}{2} + b\rho_2^2 + \sqrt{\frac{1}{4} + b\rho_2^2 - \frac{\Phi^2}{\Phi_0^2}\rho_2^4}}{\frac{1}{2} + b + \sqrt{\frac{1}{4} + b - \frac{\Phi^2}{\Phi_0^2}}} \right) \right. \\ & \left. + \frac{b\Phi_0}{2|\Phi|} \left[\arcsin \left(\frac{b - 2\frac{\Phi^2}{\Phi_0^2}}{\sqrt{\frac{\Phi^2}{\Phi_0^2} + b^2}} \right) - \arcsin \left(\frac{b - 2\frac{\Phi^2}{\Phi_0^2}\rho_2^2}{\sqrt{\frac{\Phi^2}{\Phi_0^2} + b^2}} \right) \right] \right\} \quad (1.88) \end{aligned}$$

Используя свойства ρ_2 это легко упростить:

$$\begin{aligned} \int_1^{\rho_2} p(\rho)d\rho = & -\frac{1}{2} \left\{ \sqrt{\frac{1}{4} + b - \frac{\Phi^2}{\Phi_0^2}} + \frac{1}{2} \ln \left(\frac{\sqrt{b^2 + \frac{\Phi^2}{\Phi_0^2}}}{\frac{1}{2} + b + \sqrt{\frac{1}{4} + b - \frac{\Phi^2}{\Phi_0^2}}} \right) - \right. \\ & \left. \frac{b\Phi_0}{2|\Phi|} \left[\arcsin \left(\frac{b - 2\frac{\Phi^2}{\Phi_0^2}}{\sqrt{\frac{\Phi^2}{\Phi_0^2} + b^2}} \right) + \frac{\pi}{2} \right] \right\} \quad (1.89) \end{aligned}$$

Подставляя квазиклассическую волновую функцию в ГУ для $l = 0$ получаем:

$$\tan \left(\frac{\pi}{4} - \int_1^{\rho_2} p(\rho)d\rho \right) = \frac{\left(\frac{ER}{a} + \frac{\Phi}{\Phi_0} - \frac{1}{2} + \frac{\frac{1}{16} + \frac{\Phi^2}{\Phi_0^2}}{\left((ER)^2 + \frac{1}{4} - \frac{\Phi^2}{\Phi_0^2} + \frac{2\Phi}{\Phi_0} \right)} \right)}{\sqrt{(ER)^2 + \frac{1}{4} - \frac{\Phi^2}{\Phi_0^2} + \frac{2\Phi}{\Phi_0}}} \quad (1.90)$$

Случай $l \neq 0$

Рассмотрим теперь $l \neq 0$. Тогда $a < 0$ (то a которое входит в функцию

R). Тогда

$$\int p(\rho)d\rho = \frac{1}{2} \left[\sqrt{R} - \sqrt{l^2 - \frac{1}{4}} \arcsin \frac{2a + bx}{x\sqrt{b^2 - 4ac}} - \frac{\Phi_0 b}{|\Phi| 2} \arcsin \frac{2cx + b}{\sqrt{b^2 - 4ac}} \right] \quad (1.91)$$

Немного преобразуя:

$$\int_1^{\rho_2} p(\rho)d\rho = \frac{1}{2} \left[-p(1) - \sqrt{l^2 - \frac{1}{4}} \left(\frac{\pi}{2} - \arcsin \frac{2a + b}{\sqrt{b^2 - 4ac}} \right) + \frac{\Phi_0 b}{|\Phi| 2} \left(\frac{\pi}{2} + \arcsin \frac{2c + b}{\sqrt{b^2 - 4ac}} \right) \right]$$

Теперь перейдем к случаю (3), интерференции уровней Ландау с таммовскими состояниями. В этом случае волновая функция в области $1 < \rho < \rho_1$ имеет вид:

$$\frac{C_1}{\sqrt{|p(\rho)|}} \exp \left(- \int_{\rho}^{\rho_1} |p(\rho)| d\rho \right) + \frac{C_2}{\sqrt{|p(\rho)|}} \exp \left(\int_{\rho}^{\rho_1} |p(\rho)| d\rho \right) \quad (1.92)$$

Первая экспонента (связанная с C_1) нарастает от границы $\rho = 1$ к точке поворота ρ_1 и поэтому как бы отвечает обычным уровням Ландау. Вторая экспонента (у C_2) спадает от границы и поэтому отвечает таммовским состояниям.

В области $\rho_1 < \rho < \rho_2$

$$\chi_1(\rho) = \frac{C}{\sqrt{p(\rho)}} \cos \left(\int_{\rho_2}^{\rho} p(\rho)d\rho + \frac{\pi}{4} \right) = \frac{C}{2\sqrt{p(\rho)}} \left[e^{i \left(K + \int_{\rho_1}^{\rho} p(\rho)d\rho + \frac{\pi}{4} \right)} + e^{-i \left(K + \int_{\rho_1}^{\rho} p(\rho)d\rho + \frac{\pi}{4} \right)} \right] \quad (1.93)$$

где введено обозначение

$$K = \int_{\rho_2}^{\rho_1} p(\rho)d\rho \quad (1.94)$$

Заменим слева от точки ρ_1 потенциал:

$$U(\rho) = U(\rho_1) - F(\rho - \rho_1), \quad F = -\frac{dU}{d\rho}(\rho_1) > 0 \quad (1.95)$$

И после замены переменной (пользуемся еще тем, что $U(\rho_1) = (ER)^2$):

$$\xi = -F^{\frac{1}{3}}(\rho - \rho_1) \quad (1.96)$$

приходим к уравнению Эйри

$$\left[\frac{d^2}{d\xi^2} - \xi \right] \chi_1(\xi) = 0 \quad (1.97)$$

Его решения записываются через функции Эйри:

$$\chi_1(\xi) = \alpha_1 Ai(\xi) + \alpha_2 Bi(\xi) \quad (1.98)$$

При $\xi \rightarrow -\infty$ ($\rho \rightarrow +\infty$) решение имеет асимптотику:

$$\begin{aligned} \chi_1(\xi) \rightarrow & \alpha_1 \frac{\sin\left(\frac{2}{3}|\xi|^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right)}{\sqrt{\pi}|\xi|^{\frac{1}{4}}} + \alpha_2 \frac{\cos\left(\frac{2}{3}|\xi|^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right)}{\sqrt{\pi}|\xi|^{\frac{1}{4}}} = \\ & \frac{1}{\sqrt{\pi}|\xi|^{\frac{1}{4}}} \left[\left(\frac{\alpha_2}{2} + \frac{\alpha_1}{2i}\right) e^{\frac{i\pi}{4} + i\frac{2}{3}|\xi|^{\frac{3}{2}}} + \left(\frac{\alpha_2}{2} - \frac{\alpha_1}{2i}\right) e^{-\frac{i\pi}{4} - i\frac{2}{3}|\xi|^{\frac{3}{2}}} \right] \end{aligned} \quad (1.99)$$

При $\xi \rightarrow +\infty$ ($\rho \rightarrow -\infty$)

$$\chi_1(\xi) \rightarrow \alpha_1 \frac{e^{-\frac{2}{3}\xi^{\frac{3}{2}}}}{2\sqrt{\pi}\xi^{\frac{1}{4}}} + \alpha_2 \frac{e^{\frac{2}{3}\xi^{\frac{3}{2}}}}{\sqrt{\pi}\xi^{\frac{1}{4}}} \quad (1.100)$$

Здесь соответственно коэффициент α_2 отвечает таммовским состояниям, а α_1 отвечает обычным уровням ландау. Заметим, что при $\rho \approx \rho_1$ и $\rho < \rho_1$

$$\int_{\rho}^{\rho_1} |p(\rho)| d\rho \approx \frac{2}{3}\sqrt{F}|\rho - \rho_1|^{\frac{3}{2}} = \frac{2}{3}\xi^{\frac{3}{2}}, \quad \sqrt{|p(\rho)|} = F^{\frac{1}{6}}\xi^{\frac{1}{4}} \quad (1.101)$$

При $\rho \approx \rho_1$ и $\rho > \rho_1$:

$$\int_{\rho_1}^{\rho} p(\rho) d\rho \approx \frac{2}{3}\sqrt{F}|\rho - \rho_1|^{\frac{3}{2}} = \frac{2}{3}|\xi|^{\frac{3}{2}}, \quad \sqrt{p(\rho)} = F^{\frac{1}{6}}|\xi|^{\frac{1}{4}}. \quad (1.102)$$

Сравнивая асимптотики слева и справа от точки поворота с квазиклассической волновой функцией находим:

$$C_1 = F^{\frac{1}{6}} \frac{\alpha_1}{2\sqrt{\pi}}, \quad C_2 = F^{\frac{1}{6}} \frac{\alpha_2}{\sqrt{\pi}} \quad (1.103)$$

$$\left(\frac{\alpha_2}{\sqrt{\pi}} + \frac{\alpha_1}{i\sqrt{\pi}} \right) F^{\frac{1}{6}} = C e^{iK}, \quad \left(\frac{\alpha_2}{\sqrt{\pi}} - \frac{\alpha_1}{i\sqrt{\pi}} \right) F^{\frac{1}{6}} = C e^{-iK}. \quad (1.104)$$

Или исключая α_1, α_2 :

$$C_2 - i2C_1 = Ce^{iK} \quad (1.105)$$

$$C_2 + i2C_1 = Ce^{-iK}. \quad (1.106)$$

Один из коэффициентов, например, C_1 всегда можно выбрать действительным. Как будет показано чуть ниже, это означает, что тогда и второй коэффициент C_2 тоже будет действительным. А это, в свою очередь, означает, что можно ввести $\tan \alpha = 2C_1/C_2$ так что:

$$K = \int_{\rho_2}^{\rho_1} p(\rho) d\rho = \pi n - \alpha, n \in Z. \quad (1.107)$$

Причем не трудно показать, что при $l \neq 0$

$$K = \frac{\pi \sqrt{l^2 - \frac{1}{4}}}{2} - \frac{\pi \Phi_0}{4|\Phi|} \left[(ER)^2 + \frac{2\Phi}{\Phi_0}(l+1) \right]. \quad (1.108)$$

Для численного решения удобнее использовать следующую связь:

$$\tan K = -\frac{2C_1}{C_2}. \quad (1.109)$$

Последний шаг заключается в том, чтобы найти связь между C_1 и C_2 , подставив квазиклассическую волновую функцию в ГУ:

$$\frac{2C_1}{C_2} = 2 \frac{|p(1)| - \left(\frac{ER}{a} + \frac{\Phi}{\Phi_0} - l - \frac{1}{2} \right)}{|p(1)| + \frac{ER}{a} + \frac{\Phi}{\Phi_0} - l - \frac{1}{2}} \exp \left(2 \int_1^{\rho_1} |p(\rho)| d\rho \right) \quad (1.110)$$

Встречающийся здесь интеграл при $l \neq 0$ равен

$$\int_1^{\rho_1} |p(\rho)| d\rho = \frac{1}{2} \left[-|p(1)| + \sqrt{-a} \ln \left(\frac{-2a - b + 2\sqrt{a(a+b+c)}}{\sqrt{b^2 - 4ac}} \right) - \frac{b}{2\sqrt{|c|}} \ln \frac{\sqrt{b^2 - 4ac}}{2c + b - 2\sqrt{c(a+b+c)}} \right] \quad (1.111)$$

Используя полученные дисперсионные уравнения, описывающие электронный спектр, можно построить квазиклассический спектр сразу во всех областях.

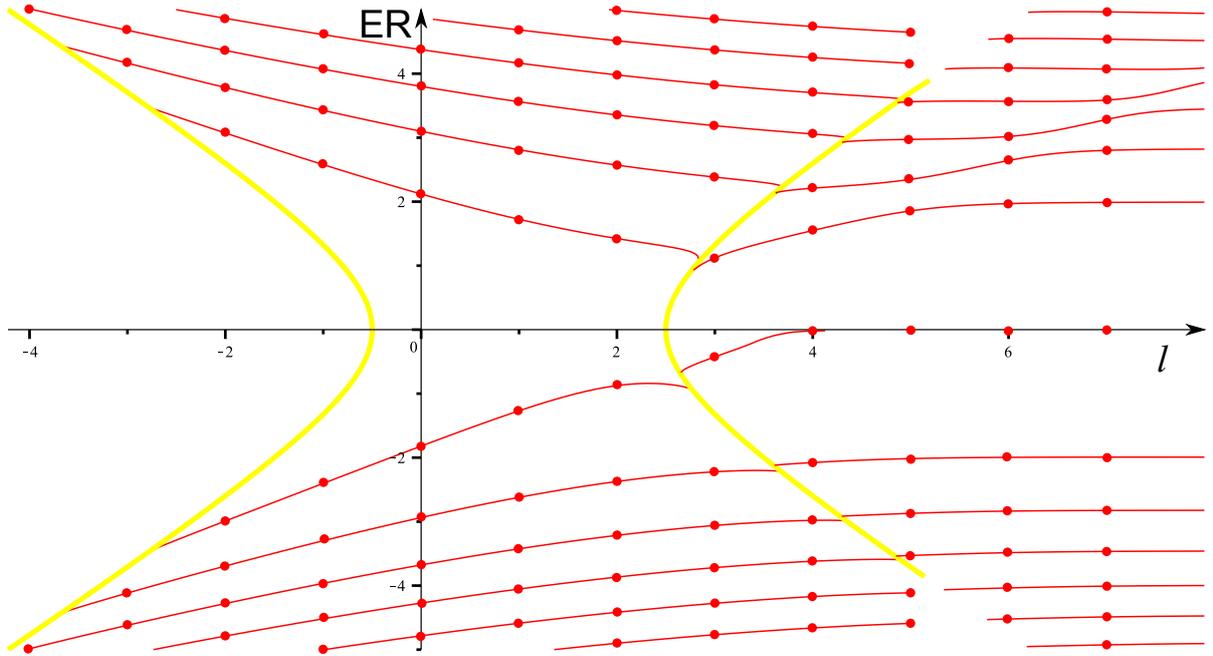


Рис. 1.10. Квазиклассический электронный спектр $E(l)$ для антиточки в магнитном поле при $a = 0.3$, $\Phi/\Phi_0 = 1$, $\hbar = c^* = 1$, для долины $s = -1$. Желтые кривые разделяют области с различным поведением волновой функции: слева движение чисто подбарьерное, в центре скачущие орбиты и, наконец, справа область интерференции таммовских состояний с уровнями Ландау.

Для примера рассмотрим спектр в долине ($s=+1$), рис. 1.10. В ней в области некоторых положительных l таммовские состояния, модифицированные магнитным полем, сосуществуют с объемными уровнями Ландау. И так же как это происходило для полуплоскости, при их пересечении происходит антикроссинг уровней. При этом таммовские состояния вдали от этого пересечения описываются простой формулой 1.78.

Точное дисперсионное уравнение, описывающее спектр электронов графеновой антиточки в перпендикулярном магнитном поле было получено В.В. Еналдиевым в [116]. Приведем здесь это решение в удобном для сравнения с квазиклассикой виде. Для этого в уравнении (1.67) сделаем замену

$$\psi_1(r) = e^{il\phi} \frac{g(r)}{r}, \quad (1.112)$$

и введем новую переменную

$$\xi = \left| \frac{eB}{2c} \right| r^2 = \frac{r^2}{2\lambda^2}, \quad (1.113)$$

где λ — по-прежнему магнитная длина. Тогда уравнение (1.67) сведется к вырожденному гипергеометрическому уравнению в форме уравнения Уиттекера:

$$\frac{d^2 g}{d\xi^2} + \left[-\frac{1}{4} + \frac{(\lambda E)^2 + l + 1}{2\xi} + \frac{1 - l^2}{4\xi^2} \right] g = 0. \quad (1.114)$$

Его общее решение представляется в виде линейной комбинации функций Уиттекера $W(k, \mu, \xi) \equiv W_{k,\mu}(\xi)$ и $WM(k, \mu, \xi) \equiv M_{k,\mu}(\xi)$ (обозначение WM введено для удобства, чтобы не путать эту функцию с функцией Куммера), где $2k = (\lambda E)^2 + l + 1$, $4\mu^2 = l^2$. Т.к. функция $WM \propto \exp(\xi/2)$, то в антиточке мы выбираем решение в виде функции W , параметр μ которой можно взять $l/2$. Прежде, чем подставлять эту функцию в ГУ, обсудим спектр в отсутствие границы, т.е. найдем поведение уровней Ландау в круговой геометрии. Нетрудно получить, что для $l > 0$ уровням Ландау, как и для плоской геометрии, отвечает спектр $E_n = \pm\sqrt{2n}$, где n — любое целое большее нуля. Но при $l < 0$ нужно быть аккуратнее. Воспользуемся, например, связью функции Уиттекера W с функцией Куммера U [96]:

$$W(k, \mu, \xi) = \exp\left(-\frac{\xi}{2}\right) \xi^{\mu+\frac{1}{2}} U(1/2 + \mu - k, 1 + 2\mu, \xi). \quad (1.115)$$

Обсудим поведение волновой функции при $r \rightarrow 0$:

$$\psi(r) \sim r^l U\left(-\frac{(\lambda E)^2}{2}, l, 2\frac{r^2}{\lambda^2}\right). \quad (1.116)$$

Поведение функция U в нуле (по r) обеспечивает нормируемость волновой функции только при $|l| < n = (\lambda E)^2/2$ [96]. Таким образом, уровни Ландау для круговой геометрии единым образом можно записать так:

$$E_n = \pm\sqrt{(2n + |l| - l)\frac{eB}{c}}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (1.117)$$

То есть уровни Ландау существуют и при положительных и при отрицательных l , но при отрицательных l «отсутствуют» низкоэнергетические уровни (у которых модуль энергии меньше $\sqrt{|2l|eB/c}$).

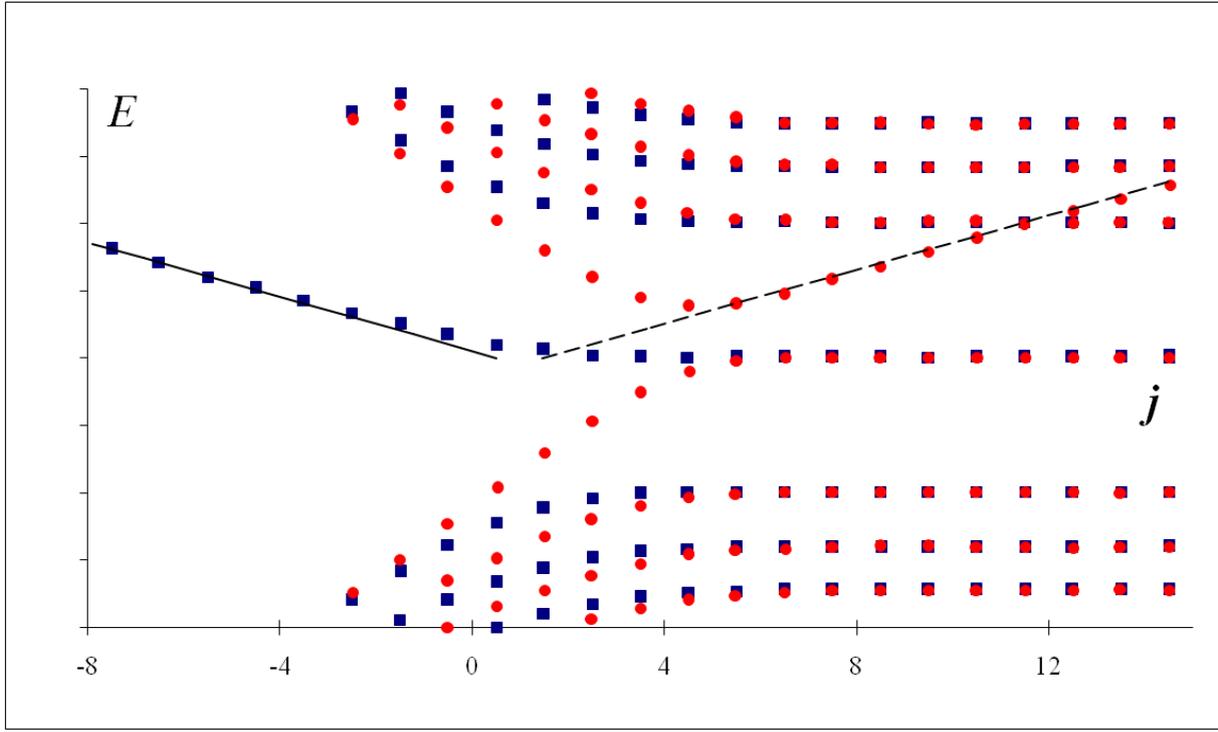


Рис. 1.11. Электронный спектр $E(j)$ для антиточки в магнитном поле при $a = 0.1$, $\Phi/\Phi_0 = 2$. Прямые отвечают асимптотам (1.78). Красные кружки соответствуют долине $s = -1$, синие квадраты - долине $s = +1$. Центры долин совмещены.

После сделанных замечаний вернемся к решению задачи о спектре антиточки. Подставляя выбранную функцию W в преобразованное ГУ:

$$\left[\frac{dg}{d\xi} + g \left(\frac{\lambda E}{\sqrt{2\xi}a} - \frac{l+1}{2\xi} + \frac{1}{2} \right) \right] \Big|_{\xi = \frac{(\lambda R_0)^2}{2}} = 0, \quad (1.118)$$

и используя свойство [96]

$$\frac{\partial W(k, \mu, \xi)}{\partial \xi} = \left(\frac{1}{2} - \frac{k}{\xi} \right) W(k, \mu, \xi) - \frac{1}{\xi} W(k+1, \mu, \xi). \quad (1.119)$$

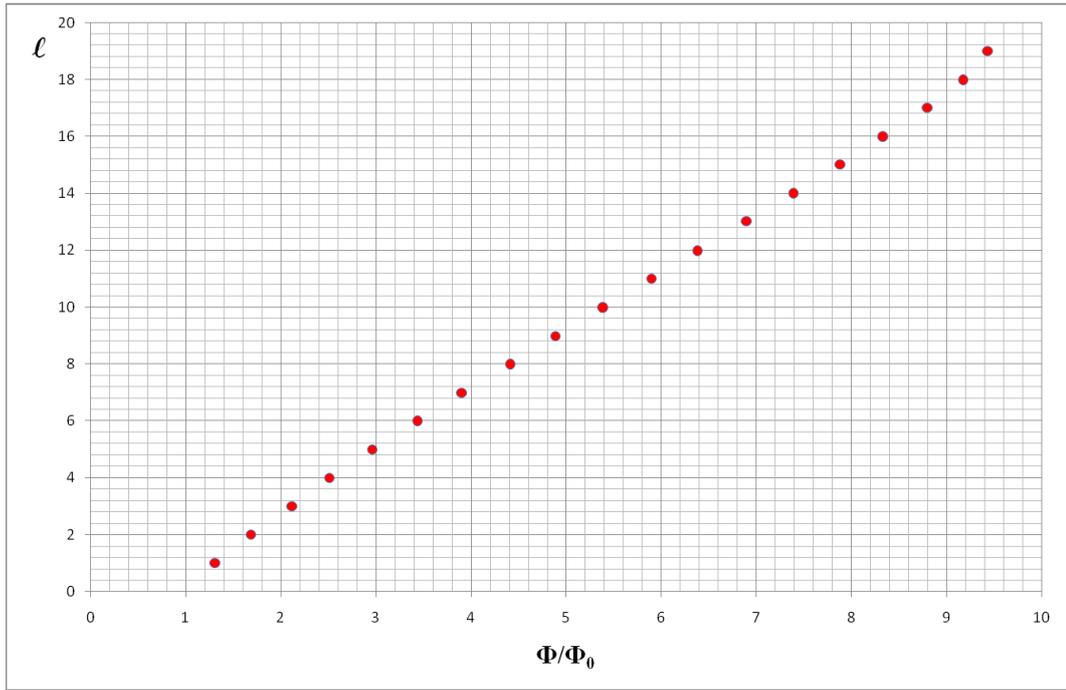
Нетрудно получить точное дисперсионное уравнение, описывающее электронный спектр графеновой антиточки:

$$\left[\frac{ER_0}{2a} - (l+1) - \frac{cE^2}{2eB} + \frac{eBR_0^2}{2c} \right] W \left(\frac{cE^2}{2eB} + \frac{l+1}{2}, \frac{l}{2}, \frac{eBR_0^2}{2c} \right) - W \left(\frac{cE^2}{2eB} + \frac{l+3}{2}, \frac{l}{2}, \frac{eBR_0^2}{2c} \right) = 0. \quad (1.120)$$

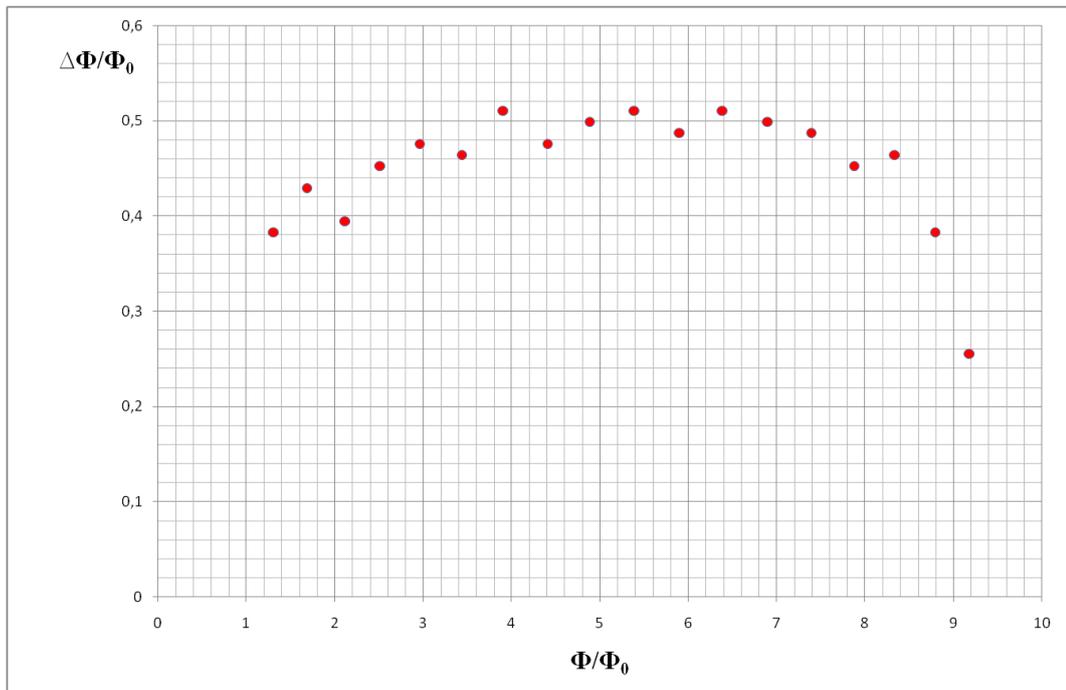
Спектр $E(l = j - 1/2)$ для антиточки при $a = 0.1$ и $\Phi/\Phi_0 = 2$ показан на рис. 1.11. В грубом приближении спектр можно представлять себе как наложение объемного спектра (уровней Ландау) на спектр магнитных ТС (1.78).

Энергии магнитных ТС в графеновой антиточке линейно зависят от разности углового момента и магнитного потока через отверстие. Это приводит к следующему эффекту. Пусть положение уровня Ферми E_F не зависит от магнитного поля и пусть он расположен в зоне проводимости ($E_F > 0$). Для определенности выберем $a > 0$. При изменении магнитного поля уровни антиточки будут пересекать уровень Ферми. Причем, сначала (при не слишком больших магнитных полях) через уровень Ферми будут проходить как магнитные таммовские уровни, так и обычные магнитные краевые уровни, которые в плоской геометрии мы называли скачущими орбитами и здесь, по аналогии, будем их так называть. Оказывается, это пересечение может быть довольно периодичным по магнитному полю. Для магнитных ТС это видно уже из асимптотик (1.78). Используя точное дисперсионное уравнение (1.120) можно проверить эти утверждения численно. Так, например, при $a = 0.1$ на рис. 1.13 и рис. 1.14 показано при каких l и каких магнитных потоках будут появляться уровни с фиксированной энергией E_F . Там же показаны интервалы по потоку $\Delta\Phi$, с которыми уровни с разными l будут проходить данный уровень энергии. Удивительно, но даже для скачущих орбит в определенном интервале магнитных полей есть периодичность, см. рис. 1.12, только период (по магнитному потоку) прохождения этих уровней через E_F примерно в два раза меньше, периода прохождения магнитных ТС. Подобная ситуация будет наблюдаться и при других значениях a или E_F .

В связи с рассмотренными особенностями поведения уровней графеновой антиточки интересно обсудить эксперименты, в которых они могут проявиться. Антиточка является неоднозначным объектом, и поэтому в ней можно ожидать проявлений квантовых интерференционных эффектов. Самым ярким из которых является эффект Ааронова-Бома. В физике твердого тела эффект Ааронова-Бома проявляется в B -периодических осцилляциях магнитосопротивления образцов, чаще всего в форме тонкого кольца, с периодом отвечающим прохождению кванта магнитного потока hc/e через площадь кольца. Приве-

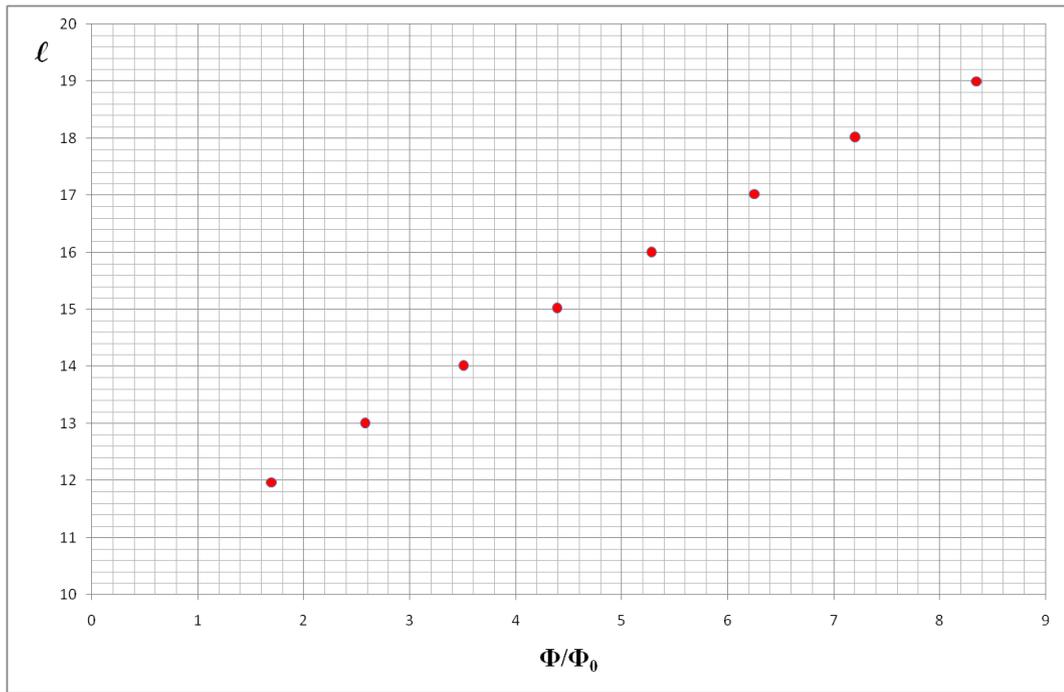


(a)

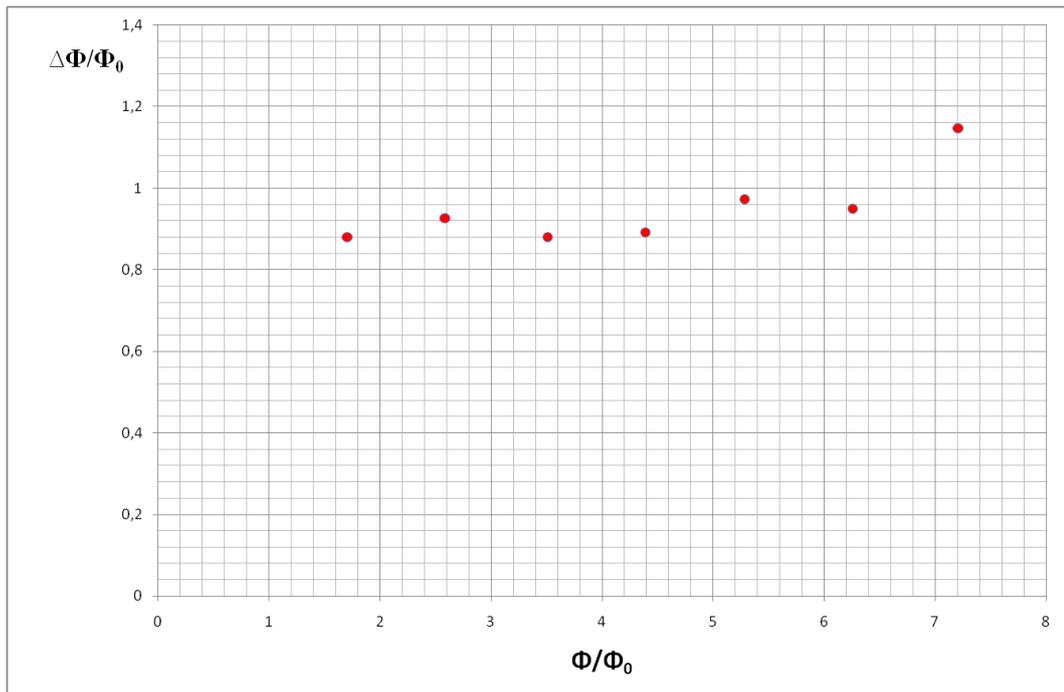


(б)

Рис. 1.12. (а) Зависимость углового момента $l = j - 1/2$ от магнитного потока Φ/Φ_0 для уровней, соответствующих скачущим орбитам в красной ($s = +1$) долине, для фиксированной энергии уровней $E\lambda = 2\hbar c^*$ (λ — магнитная длина). (б) расстояние по магнитному потоку $\Delta\Phi = \Phi(l + 1) - \Phi(l)$ в единицах Φ_0 между ближайшими уровнями с энергией $E\lambda = 2\hbar c^*$. Граничный параметр $a = 0.1$ (на обоих рисунках).

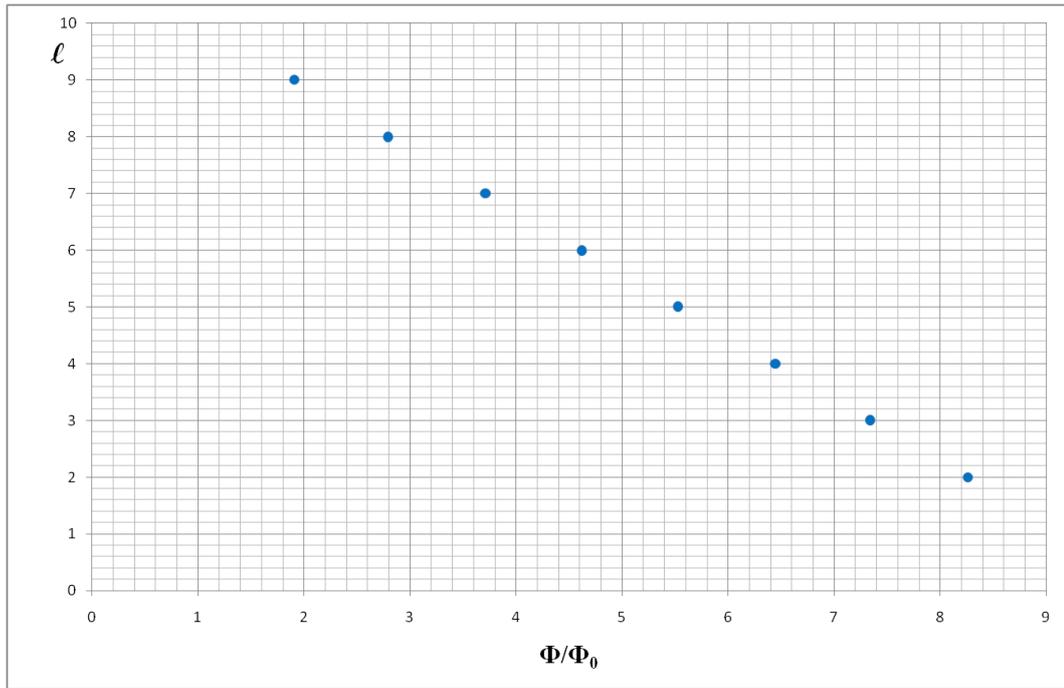


(a)

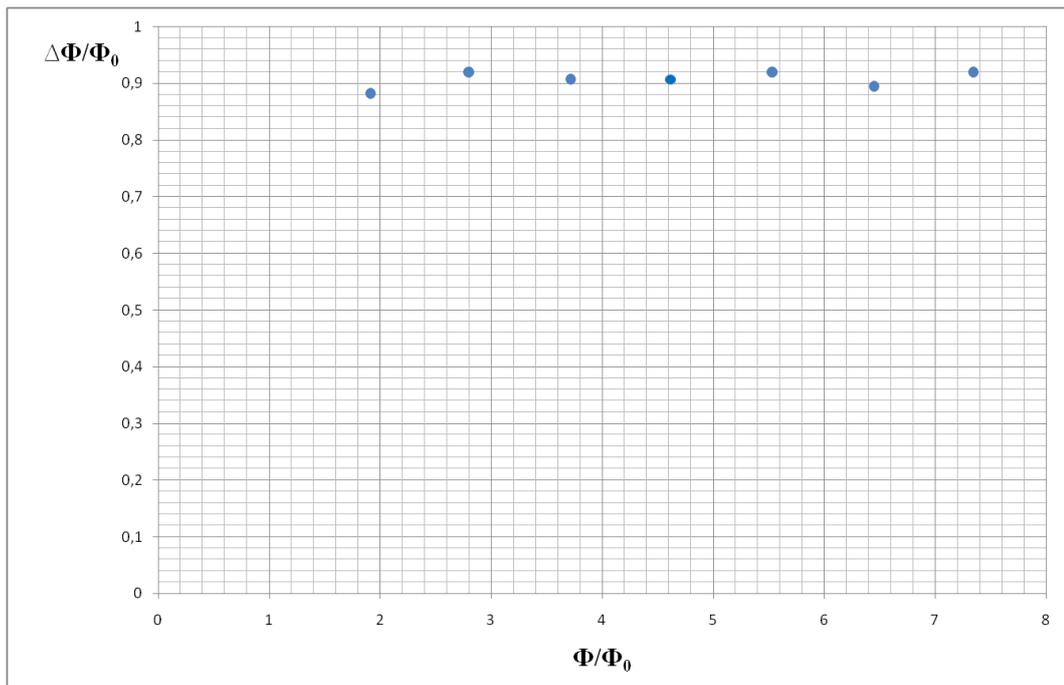


(б)

Рис. 1.13. (а) Зависимость углового момента $l = j - 1/2$ от магнитного потока Φ/Φ_0 для уровней, соответствующих магнитным таммовским состояниям в красной ($s = +1$) долине, для фиксированной энергии уровней $E\lambda = 2\hbar c^*$ (λ — магнитная длина). (б) расстояние по магнитному потоку $\Delta\Phi = \Phi(l + 1) - \Phi(l)$ в единицах Φ_0 между ближайшими уровнями с энергией $E\lambda = 2\hbar c^*$. Граничный параметр $a = 0.1$ (на обоих рисунках).



(a)



(б)

Рис. 1.14. (а) Зависимость углового момента $l = j - 1/2$ от магнитного потока Φ/Φ_0 для уровней, соответствующих магнитным таммовским состояниям в синей ($s = -1$) долине, для фиксированной энергии уровней $E\lambda = 2\hbar c^*$ (λ — магнитная длина). (б) расстояние по магнитному потоку $\Delta\Phi = \Phi(l + 1) - \Phi(l)$ в единицах Φ_0 между ближайшими уровнями с энергией $E\lambda = 2\hbar c^*$. Граничный параметр $a = 0.1$ (на обоих рисунках).

дем здесь небольшой обзор экспериментальных работ по наблюдению этого эффекта.

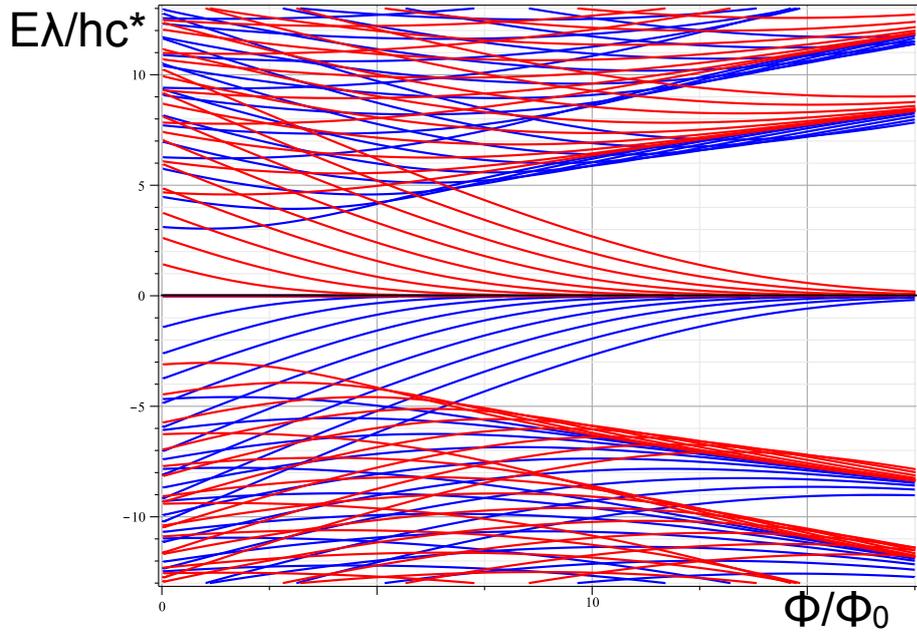
В физике твердого тела впервые эффект Ааронова-Бома наблюдался в металлических серебрянных кольцах [119] и почти одновременно в 2D системе GaAs/AlGaAs [120]. В графеновых кольцах его проявления были обнаружены в работах [121–123]. Температурная зависимость амплитуды осцилляций A в этих экспериментах (и в металлических и в графеновых кольцах) обратно пропорциональна корню из температуры T . Эксперименты в 2D электронном газе в квантовых ямах GaAs/AlGaAs проводились и на единичной антиточке [124–126], при этом антиточка создавалась подачей напряжения на затвор. Все эти осцилляции наблюдались в относительно слабых магнитных полях (до 1Тл) и при низких температурах (около 1К или меньше).

Подобные B -периодические осцилляция сопротивления проявляются не только в структурах с единичным отверстием. Так, в работе [127] наблюдали периодические по магнитному полю осцилляции магнитосопротивления в упорядоченном массиве антиточек в GaAs/AlGaAs в режиме классически сильных магнитных полей, но период этих осцилляций определялся не площадью одного отверстия, а размером элементарной ячейки h^2 , где h — расстояние между антиточками. В работе [128] в широком интервале магнитных полей (до фактора заполнения $\nu = 1$) наблюдались B -периодические осцилляции в упорядоченной решетке антиточек в GaAs/AlGaAs. В некоторых интервалах магнитного поля период этих осцилляций соответствовал прохождению кванта магнитного потока через площадь одного отверстия. Авторы объясняли это резонансным прохождением «одночастичных состояний, локализованных на каждой антиточке» (скачущих орбит в нашей терминологии) через уровень Ферми. Есть работа и по решетке антиточек в графене [129]. В ней также наблюдались осцилляции с периодом соответствующим прохождению кванта магнитного потока через отверстие антиточки (КЭХ не наблюдался). Объяснение этих осцилляций по существу отсутствовало.

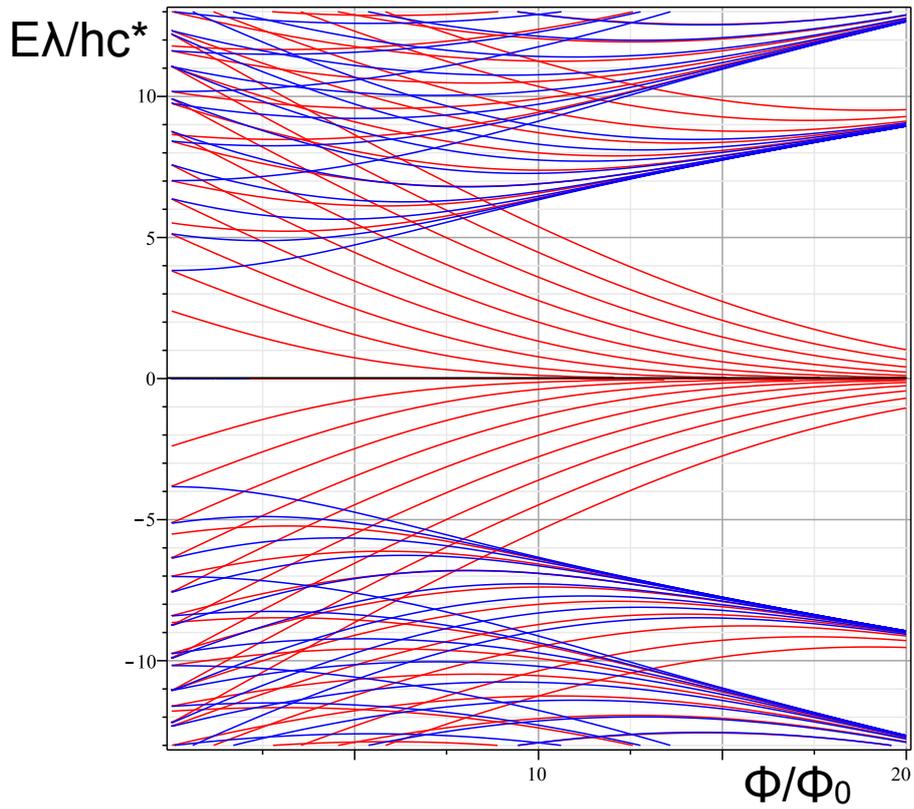
Таким образом, если говорить про геометрию антиточки, то до сих пор большинство экспериментов, в которых наблюдались периодические осцилляции сопротивления с периодом, соответствующим кванту магнитного потока через площадь антиточки, сделано на упорядоченной решетке антиточек или единичной антиточке в 2D газе в структуре GaAs/AlGaAs. Как правило, эффект проявлялся в слабых магнитных полях (до 1Тл, фактор заполнения $\nu > 1$) и всегда при низких температурах ($< 1\text{К}$).

Недавно появились работы [7, 16, 130], в которых сделана как неупорядоченная решетка антиточек, так и единичная антиточка в графеноподобных структурах, и обнаружен эффект Ааронова-Бома отвечающий прохождению кванта магнитного потока через единичное отверстие. Причем осцилляции магнитосопротивления наблюдались в сильных магнитных полях (когда заканчиваются осцилляции Шубникова — де Гааза), а температурная зависимость амплитуды осцилляций была экспоненциальная $A \propto e^{-T/T_0}$, причем величина T_0 составляет несколько десятков градусов Кельвина.

Используя приведенные выше расчеты, можно предложить объяснение этим новым экспериментальным данным. Во-первых, если примесный потенциал плавный и мал по величине, то траектории электронов можно описывать квазиклассически [131]. В таком случае изменение проводимости может быть связано с рассеянием назад через уровни антиточки (поперечное туннелирование). Когда через уровень Ферми проходит магнитный таммовский уровень, появляется дополнительный вклад в рассеяние назад и, в соответствие с формулой Ландауэра, если система находится в близком к КЭХ-у режиме, то двухконтактное сопротивление увеличивается. Однако, этот эффект должен быть экспоненциально чувствительным к расстоянию от антиточки до края (если траектории электронов соединяющие сток и исток определяются краем образца), что в обсуждаемых экспериментах вряд ли было так. Кроме того, в указанных экспериментах не наблюдался КЭХ, что по-видимому говорит о большом количестве примесей в образце. В грязных же образцах, следует ожидать ско-



(a)



(б)

Рис. 1.15. Электронный спектр $E(\Phi)$ графеновой квантовой точки для $j = 1/2, 3/2, \dots, 17/2$ для граничного параметра (а) $a = 1$, (б) $a = 0$. Φ — магнитный поток через квантовую точку, Φ_0 — квант магнитного потока, λ — магнитная длина, c^* — эффективная скорость света в графене. Долина $s = +1$ показана красным цветом, $s = -1$ — синим.

рее, что туннелирование осуществляется в продольном направлении, например, как в [124]. Графеновую антиточку в таком случае можно представлять, как резонансный рассеиватель, который перекрывает значительную часть образца и уровни энергии которого зависят от магнитного поля. Когда через уровень Ферми проходит магнитный таммовский уровень повышается вероятность прохождения через антиточку и двухконтактное сопротивление уменьшается. При таком механизме следует ожидать, что $kT_0 \sim 2ahc^*/R_0(1 + a^2)$ откуда для $T_0 = 45$ К и $R_0 = 20$ нм получаем оценку $a \sim 0.06$. Что выглядит вполне реалистично [105].

В конце раздела приведем электронный спектр графеновой квантовой точки в магнитном поле. В качестве волновой функции в этом случае нужно выбрать функцию WM , а чтобы обеспечить нормируемость волновой функции $\mu = |l|/2$. Подставляя ее в ГУ находим спектр:

$$\left[s \frac{ER_0}{2a^s} - (l+1) - \frac{cE^2}{2eB} + \frac{eBR_0^2}{2c} \right] WM \left(\frac{cE^2}{2eB} + \frac{l+1}{2}, \frac{|l|}{2}, \frac{eBR_0^2}{2c} \right) + \left(1 + \frac{l+|l|}{2} + \frac{cE^2}{2eB} \right) WM \left(\frac{cE^2}{2eB} + \frac{l+3}{2}, \frac{|l|}{2}, \frac{eBR_0^2}{2c} \right) = 0. \quad (1.121)$$

Для $a = 1$ получается известный спектр [132]. Численный расчет спектра для $l = 0, 1, 2, \dots, 8$ при $a = 0$ и $a = 1$ представлен на рис. 1.15. При больших потоках происходит формирование уровней Ландау, при малых потоках происходит выход на размерно-квантованные уровни квантовой точки 1.60.

1.6. Сечение рассеяния электронов на графеновой антиточке

В этом разделе мы найдем сечение рассеяния на антиточке (без магнитного поля). Для этого представим волновую функцию в виде комбинации нормированной плоской волны, распространяющейся в положительном направлении оси x , и рассеянных цилиндрических волн с неизвестными (пока) коэффициен-

тами

$$\psi_{scat} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \frac{e^{-ikx}}{\sqrt{2}} + \sum_{l=-\infty}^{\infty} C_l \frac{e^{il\varphi}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} H_l^{(2)}(kr) \\ -ie^{i\varphi} H_{l+1}^{(2)}(kr) \end{pmatrix}. \quad (1.122)$$

Для определенности рассмотрим энергии, расположенные в валентной зоне, т.е. $E < 0$, и введем волновой вектор $k = -E/\hbar c^* > 0$. В случае положительных энергий необходимо было бы выбрать функцию Ганкеля $H_l^{(1)}(x)$.

Поведение рассеянных цилиндрических волн на больших расстояниях от антиточки определяет амплитуду рассеяния:

$$f(\varphi) = \sqrt{\frac{2}{\pi k}} \sum_{l=-\infty}^{\infty} C_l \exp\left(il\varphi + i\frac{l\pi}{2} + i\frac{\pi}{4}\right). \quad (1.123)$$

Коэффициенты C_l определяются из ГУ. Для этого нужно разложить падающую плоскую волну по цилиндрическим волнам и подставить полную волновую функцию (учитывающую налетающую и рассеянные волны) в ГУ (1.6).

$$C_l = -(-i)^l \frac{J_l(kR) + aJ_{l+1}(kR)}{H_l^{(2)}(kR) + aH_{l+1}^{(2)}(kR)}. \quad (1.124)$$

Заметим, что из этого уравнения следует свойство: $C_{l+1} \neq C_{-l}$. Это приводит к тому, что фазы рассеяния $e^{2i\delta_j} = 1 + 2i^l C_l$, где $j = l + 1/2$ - полный угловой момент, не симметричны по j : $\delta_j \neq \delta_{-j}$. Что в свою очередь приводит к асимметрии амплитуды рассеяния по отношению к замене $\varphi \rightarrow -\varphi$, т.е. $f(\varphi) \neq f(-\varphi)$ (в одной долине). При этом полная амплитуда рассеяния, учитывающая обе долины, разумеется, симметрична.

Вычислим транспортное сечение рассеяния:

$$\sigma_{tr} = \int_0^{2\pi} (1 - \cos \varphi) |f(\varphi)|^2 d\varphi = \frac{4}{k} \sum_{l=-\infty}^{\infty} (|C_l|^2 - \text{Im}(C_l C_{l+1}^*)). \quad (1.125)$$

Зависимость транспортного сечения рассеяния от волнового вектора налетающего электрона показана на рис. 1.16. Резонансные пики возникают из-за резонансного рассеяния на квазистационарных ТС антиточки.

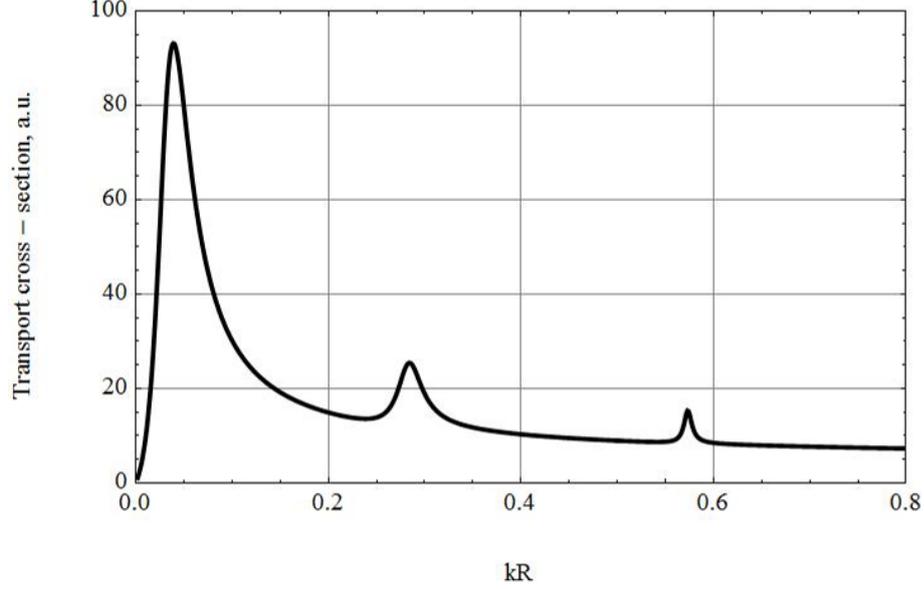


Рис. 1.16. Зависимость транспортного сечения рассеяния σ_{tr} от волнового вектора $k = |E|/\hbar c^*$ налетающего электрона для рассеяния на антиточке радиусом R с постоянным параметром ГУ $a = -0.15$.

Проанализируем аналитически поведение транспортного сечения рассеяния сначала в низкоэнергетическом пределе $kR \ll 2|a|$ и для малых $|a| \ll 1$. В этом случае рассеяния цилиндрически симметричное (s-рассеяние) и основной вклад дает "основное" квазистационарное состояния (с $l = 0$). Раскладывая функции Бесселя, найдем:

$$C_0 \approx -(-i)^l \frac{1}{1 + i\frac{2}{\pi} \left[\frac{a}{kR} - \gamma - \ln\left(\frac{kR}{2}\right) \right]}, \quad (1.126)$$

где $\gamma \approx 0,577$ - Постоянная Эйлера – Маскерони. В этом случае сечение рассеяния имеет вид:

$$\sigma_{tr} \approx \frac{4\pi^2 k R^2}{\pi^2 k^2 R^2 + 4 \left[kR \ln\left(\frac{kR}{2}\right) - a \right]^2}. \quad (1.127)$$

Полученная формула соответствует формуле (21) из работы [133] для общей теории низкоэнергетического рассеяния в графене с (внутридолинной) "длинной рассеяния" R/a .

Сечение рассеяния (1.127) стремится к нулю при малых энергиях и $a \neq 0$. Это соответствует тому, что $\delta_{1/2} \propto k$ как и для низкоэнергетического рассеяния в нерелятивистской теории [134]. Сечение упругого рассеяния $\sigma_{el} \propto |1 - e^{2i\delta_{1/2}}|^2/k \propto k$, что предполагает доминирование неупругого рассеяния при малых k . Фазы неупругого рассеяния комплексны и следует ожидать, что $\delta_{1/2}$ будет все еще пропорциональна k , но с комплексным коэффициентом (хотя в общем случае, конечно, это должно зависеть от механизма рассеяния) [134]. В этом случае полное сечение рассеяния, включающее упругий и неупругий каналы, будет конечное $\sigma_{tot} \propto [1 - \text{Re}(e^{2i\delta_{1/2}})]/k \approx \text{const}$.

Энергия первого (основного) максимума в зависимости сечения рассеяния от энергии отвечает основному состоянию квазистационарных ТС на антиточке. Величина пика $\sigma_{tr} = 4/k_0$, где k_0 - энергия основного квазистационарного ТС антиточки. Полуширина пика на полувысоте $\Delta = \pi a / [\pi^2 + 4 \ln^2(k_0/2)]$.

Остальные пики в сечении рассеяния соответствуют квазистационарным ТС с $l = l_0 \neq 0$, и определяются тем, что коэффициент C_{l_0} имеет резонансную зависимость от энергии:

$$C_{l_0} \approx -\frac{1}{1 - \frac{i l_0! (l_0 - 1)!}{2\pi} \left(\frac{2}{kR}\right)^{2l_0 + 1} (kR + 2al_0)} \approx -1, \quad (1.128)$$

в то время как остальные C_l ведут себя плавно (по энергии). Высота l_0 -го пика (отсчитанная от фона, определяемого всеми остальными l) соответствует примерно $2R/|al_0|$. Так что при малых $|al_0|$ она может быть гораздо больше геометрического сечения рассеяния на антиточке $2R$. Форма пиков имеет лоренцев вид с шириной определяемой временем жизни квазистационарного ТС.

Приведем в заключении оценки удельного сопротивления образцов графена с антиточками, используя параметры образцов из экспериментов [13, 16]: энергия Ферми $E_F \approx 20 \text{ meV} \gg kT$, концентрация антидотов $N \approx 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. Используя формулу Друде для проводимости (которая хорошо работает в графене вдали от точки Дирака), время рассеяния $\tau = 1/(N\sigma_{tr}^*)$ и транспортное сечение рассеяния $\sigma_{tr} \approx 2R \approx 20 \text{ nm}$, можно оценить 2D удельное сопротивле-

ние ("на квадрат"):

$$\rho \approx 2RN \cdot \frac{\pi^* \hbar^2}{E_F e^2} \sim 10^2 \text{ Ohm.} \quad (1.129)$$

Т.к. высота пиков транспортного сечения рассеяния может превышать $2R$, то вклад в удельное сопротивление от резонансного рассеяния на антиточках может превышать 100 Ом, что по порядку величины сходится с тем, что наблюдалось в экспериментах.

Глава 2

Краевые возбуждения в 2D топологическом изоляторе на основе Cd(Hg)Te

В первом разделе этой главы 2.1 получено граничное условие (ГУ) для 2D топологического изолятора (ТИ) на основе квантовых ям Cd(Hg)Te. Во втором разделе 2.2 проанализированы возможные спектры ТС для образца 2D ТИ в форме полуплоскости. В разделе 2.3 выводится закон дисперсии плазменных колебаний в системе краевых дираковских фермионов (КДФ), возникающих на краю системы массивных дираковских электронов, а в разделе 2.4 аналогично получается закон дисперсии плазменных колебаний в 2D ТИ.

2.1. Граничное условие

Как отмечено в разделе 3 Обзора Литературы, электронный спектр квантовых ям Cd(Hg)Te с толщиной вблизи критической $d_c \approx 6.3$ нм может быть описан эффективным гамильтонианом [5, 91]

$$H_{2D} = \sigma_0 \otimes (m(k)\tau_z - dk^2\tau_0 + vk_y\tau_y) + vk_x\sigma_z \otimes \tau_x, \quad (2.1)$$

где $\hbar\mathbf{k} = \hbar(k_x, k_y)$ 2D импульс, $k^2 = k_x^2 + k_y^2$, $v/\hbar > 0$ - эффективная скорость "света", $\sigma_{0,x,y,z}$ и $\tau_{0,x,y,z}$ - матрицы Паули действующие в пространстве спина и орбитальной степени свободы, \otimes - прямое произведение. Параметры $b, d < 0$ ответственны за дисперсию "массы" $m(k) = m_0 - bk^2$, приводят к модификации обычного (псевдо)дираковского спектра $E = \pm\sqrt{m_0^2 + v^2k^2}$ на больших импульсах и определяют возникновения фазы ТИ ($m_0 < 0$ в фазе ТИ) при толщине квантовой ямы больше d_c [5].

Обсудим возможные ГУ к гамильтониану (2.1). Для этого снова воспользуемся общими физическими соображениями. Во-первых, т.к. гамильтониан (2.1)

второго порядка по импульсу, то мы предположим, что ГУ можно представить в виде линейной комбинации от волновой функции и ее первой производной:

$$(F\partial_{\mathbf{n}}\psi + G\psi)|_S = 0, \quad (2.2)$$

где $\mathbf{n} = (\cos \alpha, \sin \alpha)$ - внешняя нормаль к краю топологического изолятора, G - некоторая (пока произвольная) матрица 4×4 . И для удобства введена матрица F

$$F = \frac{b}{v}\sigma_0 \otimes \tau_0 + \frac{d}{v}\sigma_0 \otimes \tau_z. \quad (2.3)$$

для того, чтобы сделать параметры матрицы G безразмерными. Во-вторых, мы используем эрмитовость гамильтониана, заданного в ограниченной области. Для этого выполним интегрирование по частям $\langle \psi | H_{2D} | \varphi \rangle$ для произвольной пары функций φ, ψ , и, зануляя поверхностный член, придем к следующему ограничению на матрицу G :

$$G^+ \sigma_0 \otimes \tau_z - \sigma_0 \otimes \tau_z G - i\sigma_z \otimes (\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{n}) = 0. \quad (2.4)$$

Можно проверить, что уравнение (2.4) подразумевает отсутствие тока по нормали к границе.

В-третьих, воспользуемся симметрией по отношению к инверсии времени, задающейся оператором

$$\hat{T} = i\sigma_y \otimes \tau_0 \hat{K}, \quad (2.5)$$

где \hat{K} по-прежнему оператор комплексного сопряжения. Требование коммутации оператора инверсии времени \hat{T} с матрицей ГУ G совместно с уравнением (2.4) приводит к наиболее общей форме матрицы G

$$\begin{pmatrix} g_1 & g_2 + ig_3 & 0 & g_5 + ig_6 \\ i(e^{i\alpha} + g_3) - g_2 & g_4 & g_5 + ig_6 & 0 \\ 0 & ig_6 - g_5 & g_1 & g_2 - ig_3 \\ ig_6 - g_5 & 0 & -i(e^{-i\alpha} + g_3) - g_2 & g_4 \end{pmatrix}, \quad (2.6)$$

где $g_{1,6}$ действительные феноменологические безразмерные параметры, которые должны зависеть как от параметров "объемного" гамильтониана (причем многозонного), так и от поведения кристаллического потенциала вблизи границы (определяемого в том числе и самой границей). "Открытые" ГУ соответствуют $g_1, g_4 \rightarrow \infty$, "натуральные" — соответствуют $g_2 = i \cos \alpha + (\sin \alpha)/2$, $g_3 = -(\cos \alpha)/2$ и равным нулю остальным параметрам [135]. Параметры $g_{5,6}$ запутывают состояния с разным спином и потому должны, по всей видимости, определяться величиной спин-орбитального взаимодействия (как в объемном материале, так и возможных дополнительных вкладов типа Рашбы от границы).

Наконец, возможна еще пространственная симметрия края, а именно, инверсия. Если край расположен при $x = 0$, то пространственная инверсия будет определяться заменой $y \rightarrow -y$, которой соответствует оператор

$$I_y = i\sigma_y \otimes \tau_z \hat{i}_y, \quad (2.7)$$

где \hat{i}_y (скалярный) оператор инверсии $y \rightarrow -y$. Требование коммутации оператора инверсии I_y с матрицей G приводит к $g_2 = g_5 = 0$ (при $\alpha = 0$).

2.2. Электронный спектр полубесконечного образца

Рассмотрим уравнение Шредингера $H_{2D}\psi = E\psi$ на полуплоскости $x > 0$ с ГУ (2.2), (2.6). Волновой вектор вдоль края, k_{\parallel} — хорошее квантовое число. Решения, отвечающие объемному спектру расположены в области энергий $|E - dk_{\parallel}^2| \geq \sqrt{(m_0 - bk_{\parallel}^2)^2 + (vk_{\parallel})^2}$, в то время как решения, отвечающие КС, расположены вне этой области. Волновая функция КС содержит две экспоненты, $\exp(-\kappa_1 x)$ и $\exp(-\kappa_2 x)$, рис. 2.3. Электронный спектр показан на рис. 2.1. Спектр КС, получающийся для открытых граничных условий показан сплошными (синими) кривыми. Он имеет строго линейную дисперсию. Глубины локализации КС при этом $1/\kappa_1 \approx \sqrt{b^2 - d^2}/v \approx 1$ нм (что сравнимо с межатомным

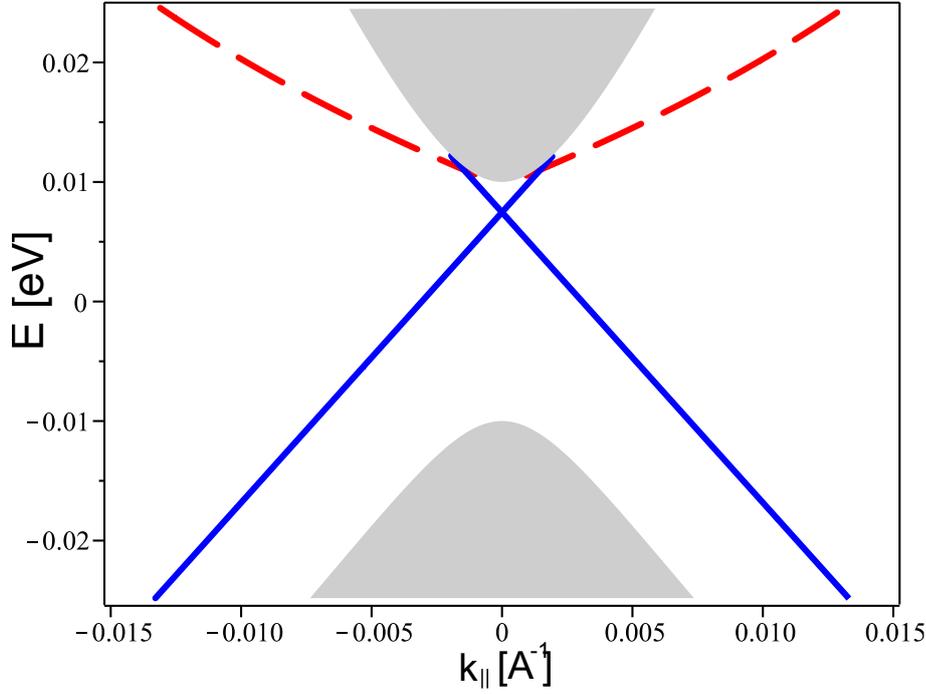


Рис. 2.1. Электронный спектр $E(k_{\parallel})$ квантовой ямы $\text{HgTe}/(\text{Hg,Cd})\text{Te}$ в форме полуплоскости. Серая область соответствует объемным (2D) состояниям. Краевые состояния показаны синим для открытых ГУ ($g_1 = g_4 = \infty$, $g_2 = g_3 = 0$) и штрих пунктирными кривыми для $g_1 = -2$, $g_4 = \infty$ (все остальные параметры в ГУ равны нулю). Объемные параметры взяты из таблицы 1 (раздел 3 Обзора литературы) для квантовой ямы толщиной 7 нм.

расстоянием!) и $1/\kappa_2 \approx 50$ нм с небольшой зависимостью от k_{\parallel} (параметры объемной структуры были взяты из [5] для $m_0 = -0.01$ эВ). Однако, если достаточно сильно увеличить параметр g_1 , то КС выталкиваются из щели, см. пунктирные кривые на том же рисунке. Можно получить и спектр краевых состояний существенно нелинейный, как на рис. 2.2.

Для того, чтобы прояснить это необычное вспомним, что при выводе гамильтониан (2.1), квадратичные по k члены, и соответственно параметры b и d , считались малыми, поэтому рассмотрим своего рода "теорию возмущений" по параметрам b, d : в нулевом порядке считаем $b = d = 0$, а в первом порядке оставим только линейный член по b (воспользуемся еще тем, что обычно он больше d по модулю).

В пределе $b = d = 0$ объемный спектр в точности дираковский. Унитар-

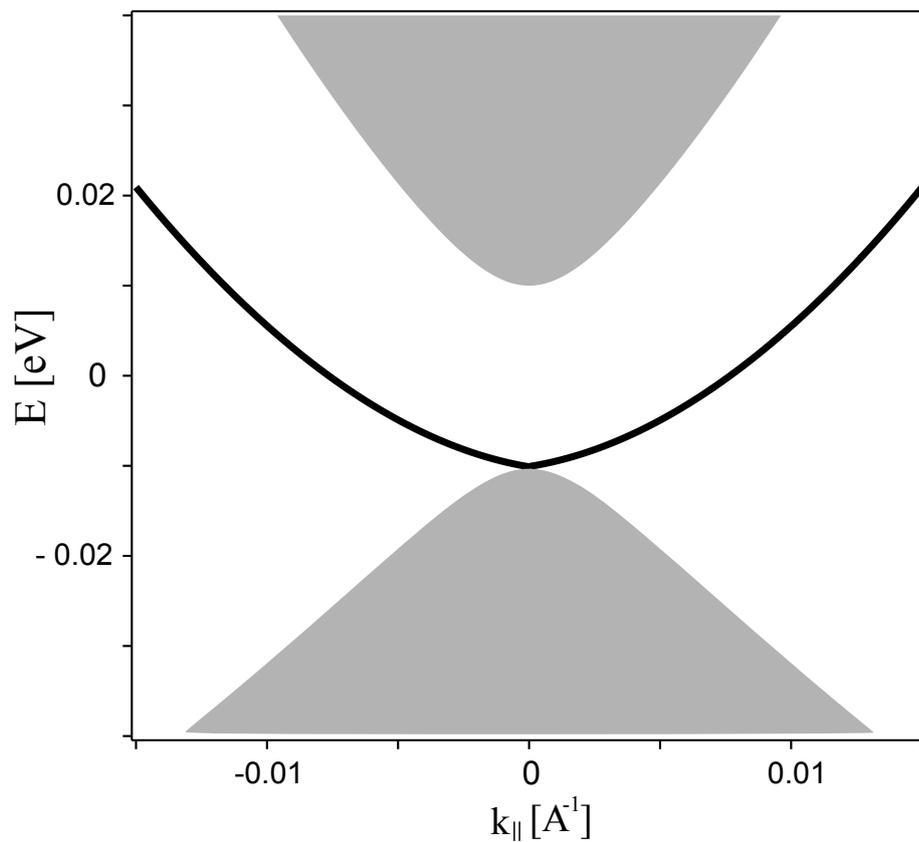


Рис. 2.2. Электронный спектр $E(k_{||})$ квантовой ямы HgTe/(Hg,Cd)Te в форме полуплоскости для параметров ГУ $g1 = -g2 = 27.4$, $g3 = 26$. Объемные параметры взяты из таблицы 1 для квантовой ямы толщиной 7 нм.

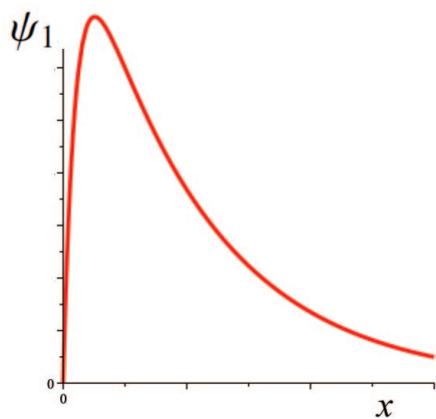


Рис. 2.3. Первая компонента волновой функции (2.50).

ным преобразованием

$$U = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sigma_0 - \sigma_z & -\sigma_x - i\sigma_y \\ \sigma_0 + \sigma_z & \sigma_x - i\sigma_y \end{pmatrix}, \quad \tilde{\psi} = U\psi \quad (2.8)$$

гамильтониан (2.1) приводится к виду:

$$UH_{2D}U^{-1} = m_0\sigma_z \otimes \tau_0 + v\sigma_x \otimes (\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{k}). \quad (2.9)$$

Это одно из представлений гамильтониана Дирака, обсуждавшегося в разделе 1 Обзора литературы (нужно только учесть еще, что $k_z = 0$). В этом случае глубина локализации $\kappa_1 \rightarrow \infty$ (по крайней мере для открытых ГУ), так что поведение волновой функции, определяемой этой глубиной локализации, выходит за рамки применимости метода эффективной массы, а также теории возмущений по k_{\parallel} (импульсу в плоскости квантовой ямы), использовавшейся при выводе гамильтониана (2.1), см. раздел 3 Обзора литературы. Однако эту часть волновой функции можно надеяться неявно учесть в ГУ, которое приведено в Обзоре литературе - формула (8). Используя прямое его можно переписать в виде:

$$\left(-ia_0 \frac{\sigma_0 + \sigma_z}{2} \otimes (\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{n}) + \frac{\sigma_x + i\sigma_y}{2} \otimes \tau_0 \right) \tilde{\psi} \Big|_S = 0. \quad (2.10)$$

Применив унитарное преобразование U к общему ГУ (2.2), (2.6) для 2D ТИ при $b, d = 0$ (в этом случае член в ГУ, содержащий производную по нормали к границе, исчезает) и сравнив с только что приведенным выражением (8), мы найдем

$$ia_0 e^{i\alpha} g_1 = (g_2 + ig_3), \quad -\frac{g_4}{a_0} = 1 + e^{-i\alpha}(g_3 + ig_2), \quad g_5 = g_6 = 0. \quad (2.11)$$

Интересно, что оставшийся произвол в параметрах g_i для данного a_0 не влияет на спектр краевых состояний на полуплоскости, который приведен на рисунке 2.4. При построение спектра мы использовали гамильтониан 2D ТИ с ненулевыми параметрами b, d (иначе мы бы просто получили спектр КС для дираковского гамильтониана, обсуждавшегося в Обзоре литературы). При малых

k , спектр КС в точности описывается уравнением (9). Для больших k , квадратичные члены в гамильтониане начинают давать заметный вклад, проявляющийся как в объемном, так и в краевом спектре, причем чем ближе область существования КС к большим k , тем больше отклонение от спектра дираковских КС (см. пунктирные кривая на рис. 2.4). Однако, применимость гамильтониана и ГУ ограничены областью малых k . Заметим, что условие возникновения КС в щели теперь ясны: если $m_0 a_0 < 0$, то КС расположены в щели (при это речь идет только об окрестности Γ -точки, т.е. при малых \mathbf{k}), если же $m_0 a_0 > 0$, то КС отсутствуют. А это и означает, что безмассовые КС (с дираковским конусом) вблизи $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ могут быть как в щели так и вне щели ТИ ($m_0 < 0$), точно также как и в тривиальном изоляторе (при $m_0 > 0$).

Далее, можно упростить общее дисперсионное уравнение, которое описывает спектр КС 2D ТИ на полуплоскости с ГУ (2.2), (2.6) при $d = 0$ и малых b . Для простоты рассмотрим ГУ, которое не запутывает спины (т.е. $g_5 = g_6 = 0$) и обладает пространственной инверсией, т.е. $y \rightarrow -y$ (т.е. дополнительно $g_2 = 0$). В первом порядке по параметру b/v можно получить спектр КС в форме (9), но с параметром

$$a_0 = -\frac{g_1(g_4 + 1) + (1 + g_3)^2}{g_4(1 + g_1) + g_3^2}. \quad (2.12)$$

Таким образом, мы показали, что открытые ГУ являются только одними из многих возможных. Решения эффективного гамильтониана (2.1) с открытыми ГУ имеют ограниченную область применимости из-за слишком резкого поведения волновой функции (и выхода за пределы применимости сделанных приближений) для малых параметров b и d . В случае малых параметров b и d удобнее пользоваться уравнением Дирака с ГУ (8), которое содержит только один параметр a_0 . А главное, мы показали, что в окрестности Γ -точки граничные параметры могут "вытолкнуть" КС из объемной щели. Ниже мы покажем, что это не противоречит топологической классификации и принципу соответствия граница-объем.

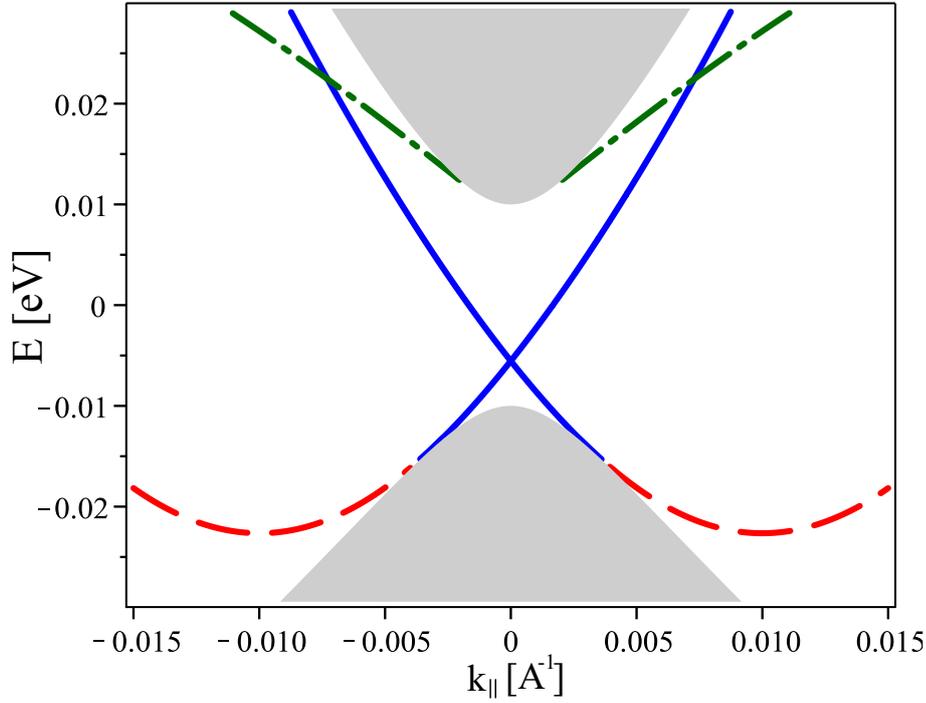


Рис. 2.4. Электронный спектр полубесконечной квантовой ямы HgTe/(Hg,Cd)Te в случае, когда ГУ описывается одним параметром (the BCs (2.2),(2.6), and (2.11)). Сплошными кривыми показаны КС при $a_0 = -2$, пунктиром — $a_0 = 0.3$ и штрих-пунктиром — $a_0 = 2$. Объемные параметры взяты из таблицы 1 для квантовой ямы толщиной 7 нм.

Для того, чтобы убедиться, что описанное выше поведение КС не противоречит топологическим соображениям В.В. Еналдиевым было предложено найти КС по всей зоны Бриллюэна [14]. Для этого мы рассмотрим простейшую модель 2D ТИ, основанную на приближении сильной связи. Подобный подход был использован для 3D ТИ [94]. Рассмотрим 2D квадратную решетку атомов (постоянную решетки примем $a = 1$), которые могут быть в 4-х различных состояниях $|s, \uparrow\rangle$, $(1/\sqrt{2})|p_x + ip_y, \uparrow\rangle$, $|s, \downarrow\rangle$, $(1/\sqrt{2})|p_x - ip_y, \downarrow\rangle$, где \uparrow (\downarrow) отвечает спину, направленному вверх (спину вниз), в положительном направлении оси z [90]. Пренебрегая для простоты членами нарушающими электрон-дырочную симметрию ($d = 0$), можно получить гамильтониан:

$$\begin{aligned}
 H = & \Psi_i^\dagger [\sigma_0 \otimes ((m_0 - 4b)\tau_z - 4d\tau_0)] \Psi_i - \\
 & i\frac{v}{2} \left[\Psi_i^\dagger \left(\sigma_0 \otimes \tau_y e^{i\theta_i^y} \Psi_{x_i, y_i+1} + \sigma_z \otimes \tau_x e^{i\theta_i^x} \Psi_{x_i+1, y_i} \right) - \right. \\
 & \left. h.c. \right] + \sum_{\mu} \left\{ \Psi_i^\dagger [\sigma_0 \otimes (b\tau_z + d\tau_0)] e^{i\theta_i^\mu} \Psi_{i+\mu} + h.c. \right\}, \quad (2.13)
 \end{aligned}$$

где нижний индекс $i = (x_i, y_i)$ нумерует узлы решетки; $i + \mu = \mu_i + 1$ с $\mu = x, y$; θ_i^μ — U(1) калибровочное поле; Ψ_i четырех компонентный оператор уничтожения электрона на узле i . Хорошо известно, что эта модель описывает 2D топологических изолятор когда $0 < m_0/(2b) < 4$, $m_0 \neq 4b$ и отвечает тривиальному изолятору во всех остальных случаях [88].

Рассмотри полубесконечную решетку, занимающую $x_i > 0$ с краем при $x_i = 0$. Из гамильтониана H можно найти выражение для тока в направлении x как вариацию гамильтониана H по отношению к калибровочному полю θ_i^x :

$$j_i^x = \left. \frac{\delta H}{\delta \theta_i^x} \right|_{\theta_i^x=0} = i \left[\Psi_i^\dagger \sigma_0 \otimes (b\tau_z + d\tau_0) \Psi_{x_i+1, y_i} - h.c. \right] + \frac{v}{2} \left(\Psi_i^\dagger \sigma_z \otimes \tau_x \Psi_{x_i+1, y_i} + h.c. \right) \quad (2.14)$$

Из условия зануления тока j^x по нормали к границе, можно получить ГУ на одно-частичную волновую функцию ψ_i в следующей форме:

$$\left(i\sigma_0 \otimes (b\tau_z + d\tau_0) + \frac{v}{2} \sigma_z \otimes \tau_x \right) \psi_{1, y_i} = G\psi_{0, y_i}, \quad (2.15)$$

где $G = G^\dagger$ — феноменологическая 4×4 матрица ГУ (она отличается от матрицы G в непрерывной модели и параметры, которые в нее входят, хотя имеют и похожий смысл, но их нельзя отождествлять с параметрами g_i в непрерывной модели), ψ_i — вектор, состоящий из четырех амплитуд волновых функций, отвечающих соответствующим орбиталям на i -м узле (не путать с оператором уничтожения Ψ_i). Учет пространственной симметрии и симметрии по отношению к инверсии времени приводит к следующей матрице G :

$$G = \begin{pmatrix} g_1 & g_2 & 0 & -ig_3 \\ g_2 & g_4 & -ig_3 & 0 \\ 0 & ig_3 & g_1 & -g_2 \\ ig_3 & 0 & -g_2 & g_4 \end{pmatrix}, \quad (2.16)$$

где $g_{1,4}$ действительные феноменологические параметры. В дальнейшем, для простоты, будем рассматривать диагональную по спину матрицу G , т.е. $g_3 = 0$ и положим $d = 0$.

Объемный спектр:

$$E = \pm \sqrt{(m_0 + 2b(\cos k_x + \cos k_y - 2))^2 + v^2(\sin^2 k_x + \sin^2 k_y)} \quad (2.17)$$

Для нахождения КС необходимо рассмотреть комплексные волновые вектора $k_x = k + iq$ для реальной энергии E . Это приводит к двум возможностям (а) $k = 0$ and $k = \pi$, (б) $\cos k \cosh q = 2bm_0 + 2b(\cos k_y - 2)/(v^2 - 4b^2)$. Мы интересуемся только энергиями внутри щели, а для них можно показать, что решения есть только в первом случае (а). Пользуясь этим можно написать общий вид волновой функции. Так, например, для спина вверх она будет иметь вид:

$$\psi_i = C_1 \begin{pmatrix} -E - M_1 \\ iv(\sinh q_1 - \sin k_y) \end{pmatrix} e^{-q_1 x_i + i k_y y_i} + C_2 \begin{pmatrix} -E - M_2 \\ -iv(\sinh q_2 + \sin k_y) \end{pmatrix} e^{i \pi x_i - q_2 x_i + i k_y y_i}, \quad (2.18)$$

где $M_{1,2} = m_0 + 2b(\pm \cosh q_{1,2} + \cos k_y - 2)$, $C_{1,2}$ — произвольные коэффициенты, связь между которыми определяется ГУ. Обратная глубина локализации $q_{1,2} > 0$ зависит от энергии и импульса k_y , параллельного границе:

$$\cosh q_{1,2} = \frac{\pm(2bm_0 + 4b^2(\cos k_y - 2))}{v^2 - 4b^2} + \quad (2.19)$$

$$\frac{\sqrt{v^2(m_0 + 2b(\cos k_y - 2))^2 + (v^2 - 4b^2)(v^2(\sin^2 k_y + 1) - E^2)}}{v^2 - 4b^2}$$

Подставляя волновую функцию (2.18) в ГУ (2.15), находим дисперсионное уравнение для спина вверх (для спина вниз оно будет отличаться только знаком перед k_y):

$$\begin{aligned} & [(g_1 - Be^{-q_1})(E + M_1) - 2A(\sinh q_1 - \sin k_y)(Ae^{-q_1} + g_2)] \times \\ & [(g_2 - Ae^{-q_2})(E + M_2) + 2A(\sinh q_2 + \sin k_y)(g_4 - Be^{-q_2})] + \\ & [(Ae^{-q_1} - g_2)(E + M_1) + 2A(\sinh q_1 - \sin k_y)(Be^{-q_1} + g_4)] \times \\ & [(Be^{-q_2} + g_1)(E + M_2) - 2A(\sinh q_1 + \sin k_y)(Ae^{-q_2} - g_2)] = 0. \end{aligned} \quad (2.20)$$

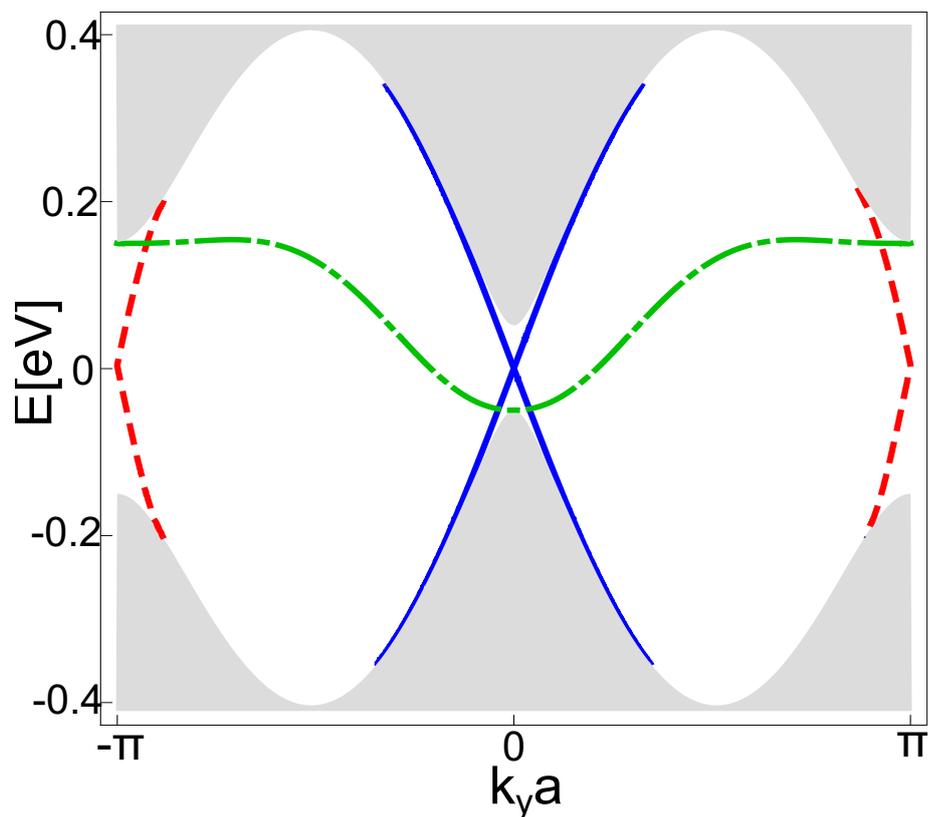


Рис. 2.5. Электронный спектр $E(k_y)$ полубесконечной 2D квадратной решетки, моделирующей 2D ТИ на основе квантовых ям Cd(Hg)Te. Сплошные кривые описывают КС, отвечающие открытым ГУ ($g_1 = g_4 = \infty$, $g_2 = g_3 = 0$), пунктирные кривые — $g_2 = 0.5$, $g_1 = 0.1$, $g_3 = g_4 = 0$, штрих-пунктир — $g_2 = g_3 = 0$, $g_4 = \infty$, $g_1 = -0.05$. Меняя параметры ГУ можно существенно изменить спектр КС и даже убрать дираковскую точку в спектре КС (штрих-пунктир).

На рис. 2.5 представлены электронные спектры. Параметры g_1, g_2, g_4 сильно модифицируют спектры КС. Можно сделать КС существенно нелинейными вблизи $k = 0$ (штрих-пунктирная кривая) или вытолкнуть их из центра зоны Бриллюэна (пунктирная кривая). При этом четность числа пересечений краевых состояний с уровнем Ферми в щели не меняется. Таким образом, полученные результаты не противоречат топологической концепции. В случае же тривиального изолятора можно легко проверить, что это число пересечений зависит от граничных параметров и КС можно полностью убрать из щели (по всей зоне Бриллюэна).

2.3. Плазменные колебания краевых дираковских фермионов в 2D системе массивных дираковских фермионов.

Как уже обсуждалось в главе «Обзор литературы», спектр 2D электронов, описываемых уравнением Дирака (6) (с конечной массой $m > 0$), на полуплоскости с ГУ (8) при $a_0 < 0$ содержит КС, расположенные в щели. В предыдущем разделе 2.2 было показано, что при параметрах $b = d = 0$ эта система фактически описывает 2D ТИ. Рассмотрим плазменные колебания, которые могут возникать в такой системе в длинноволновом пределе в рамках приближения хаотических фаз. Будем считать, что уровень Ферми расположено достаточно глубоко в щели, так что в колебаниях участвуют только краевые дираковские фермионы (КДФ), заполняющие зону КС. Для упрощения расчетов положим $\hbar = c^* = 1$ и восстановим размерность в конечных формулах. Вместо граничного параметра a_0 там, где это удобно, будем пользоваться параметром-углом γ_0 однозначно связанным с a_0 :

$$\sin \gamma_0 = \frac{2a_0}{1 + a_0^2}, \quad \cos \gamma_0 = \frac{1 - a_0^2}{1 + a_0^2}, \quad \gamma_0 \in [0, 2\pi). \quad (2.21)$$

Волновая функции КДФ на полуплоскости $z = 0, x > 0$, отвечающая

спиральности $\tau = +1$ имеет вид

$$|k_y, + \rangle = \sqrt{\frac{2\kappa_{k_y,+}}{(1+a_0^2)L}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -ia_0 \\ 0 \end{pmatrix} \exp(ik_y y - \kappa_{k_y,+} x), \quad (2.22)$$

где обратная глубина локализации КДФ (мнимая компонента импульса k_x):

$$\kappa_{k_y,+} = \frac{1-a_0^2}{1+a_0^2} k_y - \frac{2a_0}{1+a_0^2} m > 0, \quad (2.23)$$

а энергия этих состояний:

$$E_{k_y,+} = \frac{1-a_0^2}{1+a_0^2} m + \frac{2a_0}{1+a_0^2} k_y. \quad (2.24)$$

Здесь L — длина образца вдоль y (мы считаем, что $L \rightarrow \infty$). Волновая функция, отвечающая спиральности $\tau = -1$:

$$|k_y, - \rangle = \sqrt{\frac{2\kappa_{k_y,-}}{(1+a_0^2)L}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -ia_0 \end{pmatrix} \exp(ik_y y - \kappa_{k_y,-} x), \quad (2.25)$$

где

$$\kappa_{k_y,-} = -\frac{1-a_0^2}{1+a_0^2} k_y - \frac{2a_0}{1+a_0^2} m > 0. \quad (2.26)$$

Энергия этих состояний:

$$E_{k_y,-} = \frac{1-a_0^2}{1+a_0^2} m - \frac{2a_0}{1+a_0^2} k_y. \quad (2.27)$$

Будем рассматривать случай $a_0 < 0$ ($\gamma_0 \in (\pi, 2\pi)$), когда КС находятся в щели и пренебрегать изгибом зон вблизи границы. Для флуктуации концентрации КДФ $\delta n = Tr\{\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_e)\rho_1\}$ (ρ_1 — возмущение матрицы плотности, вызванное потенциалом плазмона) нетрудно получить следующее выражение:

$$\begin{aligned} \delta n(x, y, t) &= \delta n(x) \exp(-i\omega t + iq_y y) = \\ &= \sum_{q'_y, k_y, \tau} \langle k_y + q'_y, \tau | \delta(x - x_e) | k_y, \tau \rangle \frac{f_0(E_{k_y+q'_y, \tau}) - f_0(E_{k_y, \tau})}{E_{k_y+q'_y, \tau} - E_{k_y, \tau} + \omega + i0} \\ &\langle k_y, \tau | U(x, y, z=0, t) | k_y + q'_y, \tau \rangle, \end{aligned} \quad (2.28)$$

где $f_0(E)$ — функция распределения Ферми-Дирака. Из вида волновых функций видно, что переходы между состояниями с разной спиральностью τ не возникают. Вкладом объемных состояний можно пренебречь, если уровень Ферми E_F лежит достаточно глубоко в запрещенной зоне и частота плазменных колебаний ω мала, так что $\hbar\omega \ll |E_b(k_F - q_y) - E_F|$, где $E_b(k_y) = \pm\sqrt{m^2 + k_y^2}$ — граница объемного электронного спектра, q_y — волновой вектор плазмона.

Выпишем в явном виде матричные элементы потенциала

$$\begin{aligned} & \langle k_y, \tau | U(x, y, z = 0, t) | k_y + q'_y, \tau \rangle = \\ & e^{-i\omega t} 2\pi \delta(q_y + q'_y) \frac{2}{L} \sqrt{\kappa_{k_y+q'_y, \tau} \kappa_{k_y, \tau}} \int_0^\infty dx' U(x') e^{-(\kappa_{k_y, \tau} + \kappa_{k_y+q'_y, \tau})x'}, \end{aligned} \quad (2.29)$$

и оператора плотности

$$\langle k_y - q_y, \tau | \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_e) | k_y, \tau \rangle = \frac{2}{L} \sqrt{\kappa_{k_y-q_y, \tau} \kappa_{k_y, \tau}} \cdot \exp(iq_y y - (\kappa_{k_y-q_y, \tau} + \kappa_{k_y, \tau})x).$$

После суммирования по q'_y , которое осуществляется переходом к интегрированию, для флуктуации концентрации найдем:

$$\begin{aligned} \delta n(x) &= \sum_{k_y, \tau} \frac{4\kappa_{k_y-q_y, \tau} \kappa_{k_y, \tau}}{L} e^{-(\kappa_{k_y-q_y, \tau} + \kappa_{k_y, \tau})x} \frac{f_0(E_{k_y-q_y, \tau}) - f_0(E_{k_y, \tau})}{E_{k_y-q_y, \tau} - E_{k_y, \tau} + \omega} \times \\ & \times \int_0^\infty dx' U(x') e^{-(\kappa_{k_y, \tau} + \kappa_{k_y+q'_y, \tau})x'}. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Введем «краевой импульс Ферми»

$$k_F^e = \left| \frac{E_F - m \cos \gamma_0}{\sin \gamma_0} \right|. \quad (2.31)$$

Меняя местами интеграл по k_y и x' , выбирая функцию распределения Ферми-Дирака $f_0(E)$ при нулевой температуре и переходя от суммирования по k_y к интегрированию найдем:

$$\delta n(x) = \int_0^\infty dx' \frac{2U(x')}{\pi} \left[\frac{J(x+x', q_y, k_F^e, -)}{\omega + q_y \sin \gamma_0} - \frac{J(x+x', q_y, k_F^e, +)}{\omega - q_y \sin \gamma_0} \right], \quad (2.32)$$

где

$$J(x, q_y, k_F^e, \tau) = \int_{-\tau k_F^e}^{-\tau k_F^e + q_y} \kappa_{k-q_y, \tau} \kappa_{k, \tau} e^{-2(\kappa_{k-q_y, \tau} + \kappa_{k, \tau})x} dk. \quad (2.33)$$

Во втором порядке по q_y :

$$J(x, q_y, k_F^e, \tau) \approx q_y \kappa^2 \cdot e^{-2\kappa x} + o(q_y^2), \quad (2.34)$$

где введена глубина локализации КДФ на уровне Ферми

$$\kappa = |k_F^e \cos \gamma_0| - m \sin \gamma_0. \quad (2.35)$$

Заметим, что при малых $|a_0|$ или $|a_0^{-1}|$ (т.е. малых $\cos \gamma_0$) κ слабо зависит от положения уровня Ферми и определяется обратной комптоновской длиной волны электрона mc^*/\hbar .

Таким образом, для флуктуации концентрации получим:

$$\delta n(x) \approx \frac{4q_y^2 \kappa^2 |\sin \gamma_0|}{\pi(\omega^2 - q_y^2 \sin^2 \gamma_0)} \int_0^\infty dx' U(x') e^{-2\kappa(x+x')}, \quad x > 0. \quad (2.36)$$

Электрический потенциал и концентрацию связаны также уравнением Пуассона:

$$\epsilon_s \Delta U(x, y, z, t) = -4\pi e^2 \delta n(x, y, z, t) = \delta n(x) e^{-i\omega t + iq_y y} \delta(z). \quad (2.37)$$

С помощью функции Грина

$$G(x, x', y, y', z, z') = -\frac{1}{4\pi\epsilon_s \sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2 + (z-z')^2}} \quad (2.38)$$

решение уравнения Пуассона для потенциала в плоскости $z = 0$ можно записать в виде:

$$U(x) = \frac{e^2}{\epsilon_s} \int \frac{\delta n(x') e^{-iq_y(y-y')}}{\sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2}} dx' dy' = \frac{2e^2}{\epsilon_s} \int_{-\infty}^{\infty} \delta n(x') K_0(|q_y(x-x')|) dx'. \quad (2.39)$$

Подставляя сюда найденное выше возмущение концентрации, получим:

$$U(x) = -C \frac{8e^2 q_y^2 \kappa^2 \sin \gamma_0}{\pi \epsilon_s (\omega^2 - q_y^2 \sin^2 \gamma_0)} \int_0^\infty dx' e^{-2x'\kappa} K_0(|q_y(x-x')|), \quad C = \int_0^\infty dx U(x) e^{-2x\kappa}. \quad (2.40)$$

Умножая это уравнение на $\exp(-2x\kappa)$ и интегрируя по x найдем:

$$1 = \frac{8e^2 q_y^2 \kappa^2 |\sin \gamma_0|}{\pi \epsilon_s (\omega^2 - q_y^2 \sin^2 \gamma_0)} \int_0^\infty \int_0^\infty dx dx' K_0(|q_y(x-x')|) \exp(-2(x+x')\kappa). \quad (2.41)$$

В двойном интеграле сделаем замену переменных

$$\begin{cases} |q_y|(x-x') = u \\ |q_y|(x+x') = v \end{cases}, \quad \begin{cases} x = \frac{v+u}{2|q_y|} \\ x' = \frac{v-u}{2|q_y|} \end{cases}, \quad \left| \frac{\partial(x, x')}{\partial(u, v)} \right| = \frac{1}{2q_y^2}, \quad (2.42)$$

и найдем:

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty \int_0^\infty dx dx' K_0(|q_y(x-x')|) \exp(-2(x+x')\kappa) = \\ & \frac{1}{4\kappa \sqrt{4\kappa^2 - q_y^2}} \ln \left(\frac{2\kappa + \sqrt{4\kappa^2 - q_y^2}}{2\kappa - \sqrt{4\kappa^2 - q_y^2}} \right) \rightarrow \frac{1}{4\kappa^2} \ln \left(\frac{4\kappa}{|q_y|} \right). \end{aligned} \quad (2.43)$$

Откуда получаем длинноволновый закон дисперсии плазмона:

$$\omega^2 = \frac{2e^2 q_y^2 |\sin \gamma_0|}{\pi \epsilon_s} \ln \left(\frac{4\kappa}{|q_y|} \right) + q_y^2 \sin^2 \gamma_0. \quad (2.44)$$

Восстанавливая размерность и вводя скорость КДФ $v_D = c^* |\sin \gamma_0|$ перепишем закон дисперсии в окончательном виде:

$$\boxed{\omega = |v_D q_y| \sqrt{\frac{2e^2}{\epsilon_s \pi \hbar |v_D|} \ln \left(\frac{4\kappa}{|q_y|} \right) + 1}}. \quad (2.45)$$

Особенностями полученного закона дисперсии являются наличие квантовой скорости e^2/\hbar и логарифмически слабая зависимость от заполнения зоны КДФ. Проясним физический смысл этих необычных результатов. Используем

тот факт, что плотность состояний безмассовых ДФ в 1D случае не зависит от энергии. Введем концентрацию n_F и массу m_F на уровне Ферми стандартным образом:

$$n_F = \frac{|E_F - E_0|}{\pi \hbar |v_D|}, \quad m_F v_D^2 = |E_F - E_0|. \quad (2.46)$$

Вторым членом под корнем в (2.45) обычно пренебрегают. Используя (2.46), квантовую формулу (2.45) можно записать в виде (36), если принять, что латеральный размер 1D системы равен $(4\kappa)^{-1}$.

Совпадение законов дисперсии можно пояснить и следующим образом. В пределе $|q_y| \ll \kappa$ вид волновых функций, по которым усредняется кулоновское взаимодействие, не принципиален и влияет только на выражение под логарифмом в окончательном законе дисперсии, а поляризационные операторы без учета спина в системе шредингеровских электронов и в системе дираковских фермионов совпадают после линейаризации электронного спектра вблизи уровня Ферми.

Другая особенность закона дисперсии (2.45) связана с отсутствием затухания Ландау, т.к. в поляризационном операторе $\omega > |v_D q_y|$ и распад плазмона на пары электрон-дырка невозможен.

Наконец, отметим, что обсуждаемые плазменные колебания соответствуют зарядовым возбуждениям в 1D жидкости Латтинжера [136]. Также можно проделать указанный вывод и при конечных температурах и убедиться, что найденный закон дисперсии не зависит от температуры.

Выше считалось, что плазменные колебания обусловлены дальнедействующим кулоновским взаимодействием между электронами. Рассмотрим теперь случай короткодействующего взаимодействия. Это можно реализовать с помощью экранирующего металлического электрода (затвора). Давно известно [137], что затвор сильно смягчает закон дисперсии 2D плазмонов. Этот вывод справедлив, если расстояние до затвора d мало, в частности, $|q_y|d \ll 1$. Тогда уравнение Пуассона для потенциала плазмона φ сводится к уравнению

$\delta\rho = \epsilon_s\varphi/(2\pi d)$ (приближение локальной емкости). В этом приближении получим закон дисперсии экранированного 1D плазмона в системе КДФ:

$$\omega_{gated}(q_y) = |q_y| \sqrt{\frac{4|v_D|e^2\kappa d}{\epsilon_s\hbar} + v_D^2}. \quad (2.47)$$

Дисперсия стала строго линейной по q_y , а вместо логарифмической появилась степенная зависимость от глубины локализации κ^{-1} , которая, вообще говоря, зависит от E_F .

В конце этого раздела отметим, что можно было бы несколько упростить вычисления. Используя тот факт, что электрический потенциал ведет себя плавно на глубине локализации КДФ (длинноволновый предел), можно в (2.36) вынести потенциал U из под интеграла, взяв его при $x = +0$. Тогда выражение для концентрации упростится:

$$\delta n(x) \approx \frac{2q_y^2\kappa|\sin\alpha|}{\pi(\omega^2 - q_y^2\sin^2\alpha)} U(+0)e^{-2\kappa x}. \quad (2.48)$$

Подставляя это в уравнение Пуассона при $x = +0$, получим уравнение, определяющее закон дисперсии плазмона:

$$U(+0) = U(+0) \frac{4e^2q_y^2\kappa|\sin\alpha|}{\pi\epsilon_s(\omega^2 - q_y^2\sin^2\alpha)} \int_0^\infty e^{-2\kappa x'} K_0(|q_y x'|) dx', \quad (2.49)$$

из которого в пределе малых q_y , как и следовало ожидать, получаем в точности закон дисперсии (2.45).

2.4. Плазменные колебания краевых дираковских фермионов в 2D топологическом изоляторе

Рассмотрим теперь плазменные колебания, возникающие в фазе 2D ТИ в квантовых ямах Cd(Hg)Te. При выводе плазменных колебаний мы воспользуемся нулевыми ГУ, как это было сделано в работе [12].

Решим уравнение Шредингера с гамильтонианом (32) из обзора литературы на полуплоскости $x > 0$ с нулевыми ГУ. Среди решений будут как объемные, энергии E которых лежат в области $|E - Dk_y^2| \geq \sqrt{(M - Bk_y^2)^2 + Ak_y^2}$, так и локализованные вблизи края. Волновые функции КС имеют вид:

$$|k_y, + \rangle = C \begin{pmatrix} e^{-\lambda_1 x} - e^{-\lambda_2 x} \\ \frac{iB_+}{A}(\lambda_1 + \lambda_2)(e^{-\lambda_1 x} - e^{-\lambda_2 x}) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{ik_y y}, \quad (2.50)$$

и

$$|k_y, - \rangle = C^* \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ e^{-\lambda_1 x} - e^{-\lambda_2 x} \\ -\frac{iB_+}{A}(\lambda_1 + \lambda_2)(e^{-\lambda_1 x} - e^{-\lambda_2 x}) \end{pmatrix} e^{ik_y y}, \quad (2.51)$$

где C — нормировочная константа, а параметры $\lambda_{1,2}$ представляют собой мнимые k_x и определяются следующими уравнениями:

$$\lambda_{1,2}^2 = k_y^2 + \frac{A^2 - 2(MB + ED) \pm \sqrt{A^4 - 4A^2(MB + ED) + 4(MD + EB)^2}}{2B_+B_-},$$

$$E_{\pm} = M - B_+\lambda_1\lambda_2 \pm B_+k_y(\lambda_1 + \lambda_2) - B_+k_y^2. \quad (2.52)$$

Здесь знак \pm соответствует волновой функции $|k_y, \pm \rangle$.

Внутри запрещенной зоны легко получить спектр КС:

$$E_{\pm} = -\frac{MD}{B} \pm \frac{\sqrt{B_+B_-}}{B} Ak_y = E_0 \pm \hbar v_T k_y. \quad (2.53)$$

Причем это выражение является точным, а не приближенным, ср. с [138].

Для упрощения записи положим $\hbar = 1$ и восстановим размерность в конечных формулах. В дальнейшем в явном виде будем приводить выражения только для волновой функции, соответствующей $|k_y, + \rangle$.

Заметим, что для характерных параметров из таблицы 1 $v_T < 0$ и, кроме того, при малых k_y

$$A^2 \gg |2MB|, \quad A^2 \gg |2ED|. \quad (2.54)$$

При достаточно малых k_y можно получить приближенные выражения:

$$\lambda_1 \approx \frac{A}{\sqrt{B_+ B_-}} \approx 0.1 [A^{-1}], \quad k_y \ll \left| \frac{BA^2 - 2MB_+ B_-}{2AD\sqrt{B_+ B_-}} \right| \approx 0.1 [A^{-1}], \quad (2.55)$$

$$\lambda_2 \approx \sqrt{\frac{M^2 B_+ B_- + 2MD\sqrt{B_+ B_-} A k_y}{B^2 A^2}} \approx \frac{M\sqrt{B_+ B_-}}{AB} \left(1 + \frac{AD}{M\sqrt{B_+ B_-}} k_y \right) \approx$$

$$0.002 + k_y [A^{-1}], \quad k_y \ll \frac{M\sqrt{B_+ B_-}}{2AD} \approx 0.001 [A^{-1}]. \quad (2.56)$$

Рассмотрим E_F близкие к дираковской точке E_0 (точке пересечения двух ветвей КС). Используем тот факт, что $\lambda_2 \ll \lambda_1$, тогда верхний спинор волновой функции, отвечающий знаку «+», имеет вид:

$$|k_y, + \rangle \approx \sqrt{\frac{\lambda_2 B_-}{LB}} \begin{pmatrix} 1 \\ i\sqrt{\frac{B_+}{B_-}} \end{pmatrix} (e^{-\lambda_1 x} - e^{-\lambda_2 x}) e^{ik_y y}, \quad (2.57)$$

Спинор , соответствующий знаку «−» (третья и четвертая компонента волновой функции), получается из него комплексным сопряжением и заменой $k_y \rightarrow -k_y$. Используя эти волновые функции и действуя аналогично рассмотренным в разделе 2.3 плазменным колебаниям, найдем флуктуацию концентрации, вызванную полем плазмона:

$$\delta n(x) =$$

$$\frac{4\kappa_2^2}{2\pi} \left[\frac{q_y}{\omega + v_T q_y} - \frac{q_y}{\omega - v_T q_y} \right] (e^{-\kappa_1 x} - e^{-\kappa_2 x})^2 \int_0^\infty dx' U(x') (e^{-\kappa_1 x'} - e^{-\kappa_2 x'})^2 =$$

$$= \frac{4\kappa_2^2 q_y^2 |v_T|}{\pi(\omega^2 - v_T^2 q_y^2)} (e^{-\kappa_1 x} - e^{-\kappa_2 x})^2 \int_0^\infty dx' U(x') (e^{-\kappa_1 x'} - e^{-\kappa_2 x'})^2, \quad (2.58)$$

где введены $\kappa_{1,2}$ — значения $\lambda_{1,2}$ на уровне Ферми.

Подставляем найденное выражение для флуктуации концентрации в урав-

нение Пуассона, записанное в виде (2.39) получим уравнение на потенциал:

$$U(x) = C \frac{8e^2 \kappa_2^2 q_y^2 |v_T|}{\pi \epsilon_s (\omega^2 - v_T^2 q_y^2)} \int_0^\infty \left(e^{-\kappa_1 x'} - e^{-\kappa_2 x'} \right)^2 K_0(|q_y(x - x')|) dx', \quad (2.59)$$

$$C = \int_0^\infty dx' U(x') \left(e^{-\kappa_1 x'} - e^{-\kappa_2 x'} \right)^2, \quad (2.60)$$

из которого получаем дисперсионное уравнение, описывающее плазменные колебания:

$$1 = \frac{8e^2 \kappa_2^2 q_y^2 |v_T|}{\pi \epsilon_s (\omega^2 - v_T^2 q_y^2)} \int_0^\infty \int_0^\infty \left(e^{-\kappa_1 x} - e^{-\kappa_2 x} \right)^2 \left(e^{-\kappa_1 x'} - e^{-\kappa_2 x'} \right)^2 K_0(|q_y(x - x')|) dx dx'. \quad (2.61)$$

При интегрировании значимыми являются наиболее медленно падающие экспоненты. Используя то, что $\kappa_2 \ll \kappa_1$, а также то, что в пределе малых q_y :

$$\int_0^\infty \int_0^\infty e^{-ax - bx'} K_0(|q_y(x - x')|) dx dx' \approx \frac{1}{2ab} \ln \left(\frac{2b}{|q_y|} \right), \quad b \ll a, \quad (2.62)$$

находим закон дисперсии длинноволновых плазменных колебания в 2D ТИ на основе Hg(Cd)Te:

$$\omega^2 = v_T^2 q_y^2 + \frac{2e^2 q_y^2 |v_T|}{\pi \epsilon_s} \ln \left(\frac{4\kappa_2}{|q_y|} \right). \quad (2.63)$$

Восстановив размерность получим в точности закон (2.45), только теперь скорость v_T и глубина локализации КДФ κ_2 определяется исключительно объемными параметрами материала. По существу закон дисперсии зависит только от скорости КДФ, что в принципе позволяет определить ее из эксперимента.

Заключение

1. Из эрмитовости и T-инвариантности эффективного гамильтониана типа Дирака, описывающего электроны в графене, получено феноменологическое граничное условие на огибающие волновые функции. Граничное условие содержит три параметра, два из которых отвечают за междолинное рассеяние на границе, а один - за внутридолинное.
2. В пренебрежении междолинным рассеянием в графене найдены одночастичные электронные спектры для полуплоскости, полосы и квантовой точки. Спектр таммовских состояний полуплоскости представляет собой лучи, выходящие из центров долин, проекций долин на направление края.
3. Найден электронный спектр указанных в предыдущем пункте наноструктур в пренебрежении междолинным рассеянием в магнитном поле. Для полуплоскости происходит долинное расщепление основного уровня Ландау, зависящее от граничного параметра. В антиточке при изменении магнитного поля уровни таммовских состояний почти периодически проходят через уровень Ферми. При учете резонансного туннелирования электронов через таммовские уровни антиточки это должно приводить к периодическим осцилляциям магнитосопротивления, с периодом близким к прохождению кванта магнитного потока через площадь отверстия.
4. Предложено общее граничное условие для 2D топологического изолятора на основе квантовых ям Cd(Hg)Te, удовлетворяющее общим физическим требованиям. Оно содержит 6 феноменологических параметров, два из которых зануляются при учете зеркальной симметрии края. При некоторых значениях граничных параметров краевые состояния могут отсутствовать вблизи центра проективной зоны Бриллюэна или иметь существенно нелинейную дисперсию.
5. Длинноволновые плазменные колебания в 2D топологическом изоляторе на основе квантовых ям Cd(Hg)Te могут быть описаны классическим за-

коном дисперсии 1D плазмонов если ввести эффективную массу на уровне Ферми. Роль характерного размера системы играет четверть глубины локализации краевого состояния.

Список сокращений и условных обозначений

ГУ — граничное условие

ДФ — дираковские фермионы

КДФ — краевые дираковские фермионы

КС — краевые состояния

МСС — модель сильной связи

ПС — поверхностные состояния

ТИ — топологический изолятор

ТС — таммовские состояния

Литература

1. Castro Neto A. H., Guinea F., Peres N. M. R. et al. The electronic properties of graphene // [Rev. Mod. Phys.](#) 2009. Vol. 81, no. 1. P. 109.
2. Nakada K., Fujita M., Dresselhaus G., Dresselhaus M. S. Edge state in graphene ribbons: Nanometer size effect and edge shape dependence // [Phys. Rev. B.](#) 1996. Vol. 54, no. 24. P. 17954.
3. Сорокин П. Б., Чернозатонский Л. А. Полупроводниковые наноструктуры на основе графена // [УФН.](#) 2013. Т. 183, № 2. С. 113.
4. Hasan M. Z., Kane C. L. Colloquium: topological insulators // [Rev. Mod. Phys.](#) 2010. Vol. 82, no. 4. P. 3045.
5. Qi X.-L., Zhang S.-C. Topological insulators and superconductors // [Rev. Mod. Phys.](#) 2011. Vol. 83, no. 4. P. 1057.
6. König M., Wiedmann S., Brüne C. et al. Quantum spin Hall insulator state in HgTe quantum wells // [Science.](#) 2007. Vol. 318, no. 5851. P. 766.
7. Latyshev Y. I., Orlov A. P., Shustin E. G. et al. Aharonov-Bohm effect on columnar defects in thin graphite and graphene // [Journal of Physics: Conference Series.](#) 2010. Vol. 248, no. 1. P. 012001.
8. Волков В. А., **Загороднев И. В.** Электроны вблизи края графена // [Физика низких температур.](#) 2009. Т. 35, № 1. С. 5–9.
9. **Загороднев И. В.**, Волков В. А. Граничные условия для дираковских фермионов в графене // [Нелинейный мир.](#) 2009. Т. 7, № 6. С. 485–486.
10. **Загороднев И. В.**, Волков В. А. Краевые состояния дираковских фермионов в графене // [Нелинейный мир.](#) 2010. Т. 8, № 2. С. 108–109.

11. **Загороднев И. В.**, Еналдиев В. В., Волков В. А. Спектр дираковских фермионов в полубесконечном графене в магнитном поле // *Нелинейный мир*. 2011. Т. 8, № 2. С. 108–109.
12. Волков В. А., **Загороднев И. В.** Плазменные колебания краевых дираковских фермионов // *Письма в ЖЭТФ*. 2013. Т. 97, № 7-8. С. 469–472.
13. Латышев Ю. И., Орлов А. П., Фролов А. В., Волков В. А., **Загороднев И. В.**, Скуратов В. А. Орбитальное квантование в системе краевых дираковских фермионов в наноперфорированном графене // *Письма в ЖЭТФ*. 2013. Т. 98. С. 242.
14. Enaldiev V. V., **Zagorodnev I. V.**, Volkov V. A. Boundary Conditions and Surface State Spectra in Topological Insulators // *Письма в ЖЭТФ*. 2015. Т. 101, № 2. С. 89.
15. Volkov V. A., **Zagorodnev I. V.** Electron states near graphene edge // *Journal of Physics: Conference Series*. 2009. Vol. 193, no. 1. P. 012113.
16. Latyshev Y. I., Orlov A. P., Volkov V. A., Enaldiev V. V., Zagorodnev I.V., et al. Transport of Massless Dirac Fermions in Non-topological Type Edge States. // *Scientific reports*. 2014. Vol. 4. P. 7578.
17. Volkov V. A., **Zagorodnev I. V.** Edge states in graphene // *International Symposium on Graphene Devices: Technology, Physics, and Modeling*. University of Aizu, Aizu-Wakamatsu, Japan, 2008. P. 12–13.
18. **Загороднев И. В.**, Волков В. А. Краевые состояния в графене // “Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук”: Труды 51-й научной конференции МФТИ, Часть II. Общая и прикладная физика. МФТИ, 2008. С. 151–154.

19. Volkov V. A., **Zagorodnev I. V.** Tamm-Dirac states in graphene // Proceedings 17th International Symposium “Nanostructures: Physics and Technology”. Minsk, Belarus: Ioffe Physical-Technical Institute of the RAS, 2009. P. 298–299. URL: <http://www.issp.ac.ru/ebooks/conf/nano09hr.pdf>.
20. Volkov V. A., **Zagorodnev I. V.** Electron states near graphene edge // Proceedings 16th International Conference on Electron Dynamics in Semiconductors, Optoelectronics and Nanostructures (EDISON 16). Montpellier,; d’AVL DIFFUSION, Montpellier, France, 2009. P. 140.
21. **Загороднев И. В.**, Волков В. А. Граничные условия для уравнения Вейля-Дирака и краевые состояния таммовского типа в графене // Тезисы докладов 9-ой Российской конференции по физике полупроводников. 2009. С. 278.
22. Volkov V. A., Enaldiev V. V., **Zagorodnev I. V.** Quantum antidot in graphene // Proceedings 18th International Symposium “Nanostructures: Physics and Technology”. 2010. P. 92–93. URL: <http://www.issp.ac.ru/ebooks/conf/nano10hr.pdf>.
23. Волков В. А., **Загороднев И. В.**, Еналдиев В. В. Свойства графена: избранные результаты // Труды XIV международного симпозиума Нанопизика и нанофотоника. Нижний Новгород: 2010. С. 307.
24. **Zagorodnev I. V.**, Volkov V. A. Size quantization in graphene nanoribbon // Proceedings 18th International Symposium “Nanostructures: Physics and Technology”. 2010. P. 166–167. URL: <http://www.issp.ac.ru/ebooks/conf/nano10hr.pdf>.
25. Волков В. А., Еналдиев В. В., **Загороднев И. В.** Размерное квантование дираковских 2D фермионов // Программа и тезисы докладов XVIII

Уральской международной зимней школы по физике полупроводников. 2010. С. 84.

26. **Загороднев И. В.**, Еналдиев В. В., Волков В. А. Краевые состояния в графене // Сборник трудов XIII Школы молодых ученых "Актуальные проблемы физики". ФИАН, 2010. С. 121–123.
27. Волков В. А., **Загороднев И. В.** Эффекты типа Ааронова-Бома для дираковских электронов // Труды XV международного симпозиума Нанофизика и нанофотоника. 2011. С. 115.
28. Волков В. А., **Загороднев И. В.**, Еналдиев В. В. Осцилляции Ааронова-Бома в сопротивлении неодносвязного графена, обусловленные краевыми состояниями Тамма-Дирака // Тезисы X Российской конференции по физике полупроводников. 2011. С. 207.
29. **Загороднев И. В.**, Волков В. А. Краевые плазменные колебания в 2D электронных системах с релятивистскими "таммовскими" состояниями // Тезисы XI Российской конференции по физике полупроводников. 2013. Р. 100.
30. Enaldiev V. V., **Zagorodnev I. V.**, Volkov V. A. Interface Effect on Surface and Edge states in Topological Insulators // 22-nd International Symposium "Nanostructures: Physics and Technology". 2014. P. 146.
31. **Zagorodnev I. V.**, Enaldiev V. V., Volkov V. A. Do Surface and Edge States of Topological Insulators Always Exist in Bulk Gap // 9th Advanced Research Workshop Fundamentals of Electronic Nanosystems "NanoPeter 2014". P. 92.
32. **Загороднев И. В.**, Еналдиев В. В., Волков В. А. Существование поверхностных состояний и проблема граничных условий для эффективного гамильтониана в топологических изоляторах // Сборник

- трудов XV Школы молодых ученых "Актуальные проблемы физики". 2014. P. 27.
33. Девизорова Ж. А., **Загороднев И. В.**, Еналдиев В. В., Волков В. А. Резонансное рассеяние электронов на квазистационарных таммовских уровнях графеновой антиточки // Сборник трудов XV Школы молодых ученых "Актуальные проблемы физики". 2014. P. 106.
34. **Загороднев И. В.**, Девизорова Ж. А., Еналдиев В. В., Волков В. А. Рассеяние электронов на квазистационарных уровнях графеновой антиточки // Тезисы XIV Международной школы-конференции "Проблемы физики твердого тела и высоких давлений". 2015. URL: http://school.lpi.ru/proceedings/zagorodnev_upd.pdf.
35. **Загороднев И. В.**, Еналдиев В. В., Волков В. А. Зависимость спектра поверхностных состояний в 2D и 3D топологических изоляторах от условий на поверхности // Тезисы XII Российской конференции по физике полупроводников. 2015. URL: http://semicond-2015.lebedev.ru/file.php?id_tname=191&tname=article.
36. **Загороднев И. В.**, Девизорова Ж. А., Еналдиев В. В., Волков В. А. Рассеяние электронов на квазистационарных уровнях графеновой антиточки // Тезисы XII Российской конференции по физике полупроводников. 2015. P. 255. URL: http://semicond-2015.lebedev.ru/file.php?id_tname=193&tname=article.
37. **Zagorodnev I. V.**, Devizorova Zh. A., Enaldiev V. V. Resonant electron scattering by graphene antidot. [ArXiv:1509.08698](https://arxiv.org/abs/1509.08698). 2015.
38. Тамм И. Е. О возможных связанных состояниях электронов на поверхности кристалла // Phys. Z. Sowjetunion. 1932. Т. 1. С. 733.

39. Лифшиц И. М., Пекар С. И. Таммовские связанные состояния электронов на поверхности кристалла и поверхностные колебания атомов решетки // УФН. 1955. Т. 56. С. 531.
40. Дэвисон С., Левин Дж. Поверхностные (таммовские) состояния. Москва: Мир, 1973.
41. Оура К., Лифшиц В. Г., Саранин А. А. и др. Введение в физику поверхности. Москва: Наука, 2006.
42. Surface science: The first thirty years / Ed. by C. B. Duke. Amsterdam: North-Holland, 1994.
43. Luttinger J. M., Kohn W. Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields // *Phys. Rev.* 1955. Vol. 97. P. 869.
44. Цидильковский И. М. Зонная структура полупроводников. Москва: Наука, 1978.
45. Волков В. А. Размерное квантование и поверхностные состояния в полупроводниках с узкой запрещенной зоной: Кандидатская диссертация / Институт радиотехники и электроники АН СССР. 1976.
46. Волков В. А., Пинскер Т. Н. Размерное квантование и поверхностные состояния в полупроводниках // ЖЭТФ. 1976. Т. 70. С. 2268.
47. Келдыш Л. В. Глубокие уровни в полупроводниках // ЖЭТФ. 1963. Т. 45. С. 364.
48. Nimtz G., Schlicht B. *Narrow-gap lead salts* // *Narrow-Gap Semiconductors*. Springer Berlin Heidelberg, 1983. Vol. 98 of Springer Tracts in Modern Physics. P. 1–117.

49. Волков В. А., Пинскер Т. Н. Спиновое расщепление электронного спектра в ограниченных кристаллах с релятивистской зонной структурой // Физика твердого тела. 1981. Т. 23. С. 1756.
50. Волков В. А., Панкратов О. А. Безмассовые двумерные электроны в инверсионном контакте // Письма в ЖЭТФ. 1985. Т. 42, № 4. С. 145.
51. Pankratov O. A., Volkov V. A. Modern Problems in Condensed Matter Sciences Volume 27.2 // Ed. by G. Landwehr, E. Rashba. North-Holland, 1991. P. 817–853.
52. Jackiw R., Rebbi C. Solitons with fermion number $1/2$ // [Phys. Rev. D](#). 1976. Vol. 13, no. 12. P. 3398.
53. Волков В. А., Идлис Б. Г., Усманов М. Ш. Приграничные состояния в неоднородных полупроводниковых структурах // [УФН](#). 1995. Т. 165, № 7. С. 799–810.
54. Novoselov K. S., Geim A. K., Morozov S. V. et al. Electric field effect in atomically thin carbon films // [Science](#). 2004. Vol. 306, no. 5696. P. 666.
55. Slonczewski J. C., Weiss P. R. Band Structure of Graphite // [Phys. Rev.](#) 1958. Vol. 109, no. 2. P. 272.
56. Ando T. Theory of Electronic States and Transport in Carbon Nanotubes // [Journal of the Physical Society of Japan](#). 2005. Vol. 74, no. 3. P. 777.
57. Beenakker C. W. J. Colloquium: Andreev reflection and Klein tunneling in graphene // [Rev. Mod. Phys.](#) 2008. Vol. 80, no. 4. P. 1337.
58. Fujita M., Wakabayashi K., Nakada K., Kusakabe K. Peculiar localized state at zigzag graphite edge // [Journal of the Physical Society of Japan](#). 1996. Vol. 65, no. 7. P. 1920.

59. Wakabayashi K., Takane Y., Yamamoto M., Sigrist M. Edge effect on electronic transport properties of graphene nanoribbons and presence of perfectly conducting channel // [Carbon](#). 2009. Vol. 47, no. 1. P. 124.
60. Wakabayashi K. Low-Energy Physical Properties of Edge States in Nano-Graphite: Ph.D. thesis / University of Tsukuba. 2000.
61. Peres N. M. R., Guinea F., Castro Neto A. H. Electronic properties of disordered two-dimensional carbon // [Phys. Rev. B](#). 2006. Vol. 73, no. 12. P. 125411.
62. Sasaki K., Murakami S., Saito R. Stabilization mechanism of edge states in graphene // [Applied Physics Letters](#). 2006. Vol. 88, no. 11. P. 113110.
63. Li W., Tao R. Edge States of Monolayer and Bilayer Graphene Nanoribbons // [Journal of the Physical Society of Japan](#). 2012. Vol. 81. P. 024704.
64. Klos J. Surface states in zigzag and armchair graphene nanoribbons. [arXiv:0902.0914](#).
65. Maksimov P., Rozhkov, A.V.; Sboyshakov A. Localized electron states near the armchair edge of graphene // [Phys. Rev. B](#). 2013. Vol. 88. P. 245421.
66. Miyamoto Y., Nakada K., Fujita M. First-principles study of edge states of H-terminated graphitic ribbons // [Phys. Rev. B](#). 1999. Vol. 59, no. 15. P. 9858.
67. Koskinen P., Malola S., Häkkinen H. Self-Passivating Edge Reconstructions of Graphene // [Phys. Rev. Lett.](#) 2008. Vol. 101, no. 11. P. 115502.
68. Wassmann T., Seitsonen A. P., Saitta A. M. et al. Structure, Stability, Edge States, and Aromaticity of Graphene Ribbons // [Phys. Rev. Lett.](#) 2008. Vol. 101, no. 9. P. 096402.

69. Lee G., Cho K. Electronic structures of zigzag graphene nanoribbons with edge hydrogenation and oxidation // [Phys. Rev. B](#). 2009. Vol. 79, no. 16. P. 165440.
70. Gan C. K., Srolovitz D. J. First-principles study of graphene edge properties and flake shapes // [Phys. Rev. B](#). 2010. Vol. 81, no. 12. P. 125445.
71. Kroes J. M. H., Akhukov M. A., Los J. H. et al. Mechanism and free-energy barrier of the type-57 reconstruction of the zigzag edge of graphene // [Phys. Rev. B](#). 2011. Vol. 83, no. 16. P. 165411.
72. Berry M. V., Mondragon R. J. Neutrino billiards: time-reversal symmetry-breaking without magnetic fields // [Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences](#). 1987. Vol. 412, no. 1842. P. 53.
73. Peres N. M. R., Castro Neto A. H., Guinea F. Dirac fermion confinement in graphene // [Phys. Rev. B](#). 2006. Vol. 73. P. 241403.
74. Peres N. M. R., Rodrigues J. N. B., Stauber T., Lopes dos Santos J. M. B. Dirac electrons in graphene-based quantum wires and quantum dots // [J. Phys.: Condens. Matter](#). 2009. Vol. 21, no. 34. P. 344202.
75. Brey L., Fertig H. A. Edge states and the quantized Hall effect in graphene // [Phys. Rev. B](#). 2006. Vol. 73, no. 19. P. 195408.
76. McCann E., Fal'ko V. I. Symmetry of boundary conditions of the Dirac equation for electrons in carbon nanotubes // [J. Phys.: Condens. Matter](#). 2004. Vol. 16, no. 13. P. 2371.
77. Akhmerov A. R., Beenakker C. W. J. Boundary conditions for Dirac fermions on a terminated honeycomb lattice // [Phys. Rev. B](#). 2008. Vol. 77, no. 8. P. 085423.

78. Han M. Y., Özyilmaz B., Zhang Y., Kim P. Energy band-gap engineering of graphene nanoribbons // [Phys. Rev. Lett.](#) 2007. Vol. 98, no. 20. P. 206805.
79. Li X., Wang X., Zhang L. et al. Chemically derived, ultrasmooth graphene nanoribbon semiconductors // [Science](#). 2008. Vol. 319, no. 5867. P. 1229.
80. Casiraghi C., Hartschuh A., Qian H. et al. Raman spectroscopy of graphene edges // [Nano letters](#). 2009. Vol. 9, no. 4. P. 1433.
81. You Y., Ni Z., Yu T., Shen Z. Edge chirality determination of graphene by Raman spectroscopy // [Applied Physics Letters](#). 2008. Vol. 93, no. 16. P. 163112.
82. Ritter K. A., Lyding J. W. The influence of edge structure on the electronic properties of graphene quantum dots and nanoribbons // [Nature Materials](#). 2009. Vol. 8. P. 235.
83. Tao C., Jiao L., Yazyev O. V. et al. Spatially resolving edge states of chiral graphene nanoribbons // [Nature Physics](#). 2011. Vol. 7, no. 8. P. 616.
84. Kane C. L., Mele E. J. Quantum spin Hall effect in graphene // [Phys. Rev. Lett.](#) 2005. Vol. 95, no. 22. P. 226801.
85. Yao Y., Ye F., Qi X.-L. et al. Spin-orbit gap of graphene: First-principles calculations // [Phys. Rev. B](#). 2007. Vol. 75, no. 14. P. 041401.
86. Kane C. L., Mele E. J. Z_2 Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect // [Phys. Rev. Lett.](#) 2005. Vol. 95, no. 14. P. 146802.
87. Fu L., Kane C. L., Mele E. J. Topological Insulators in Three Dimensions // [Phys. Rev. Lett.](#) 2007. Vol. 98, no. 10. P. 106803.
88. Fu L., Kane C. L. Topological insulators with inversion symmetry // [Phys. Rev. B](#). 2007. Vol. 76, no. 4. P. 045302.

89. Volovik G. The Universy in a Helium Droplet. CLARENDON PRESS, Oxford, 2003.
90. Bernevig B. A., Hughes T. L., Zhang S.-C. Quantum spin Hall effect and topological phase transition in HgTe quantum wells // [Science](#). 2006. Vol. 314, no. 5806. P. 1757.
91. Raichev O. E. Effective Hamiltonian, energy spectrum, and phase transition induced by in-plane magnetic field in symmetric HgTe quantum wells // [Phys. Rev. B](#). 2012. Vol. 85, no. 4. P. 045310.
92. Winkler R. Spin-Orbit Coupling Effects in Two-dimensional Electron and Hole Systems. Springer, 2003.
93. Shen S.-Q., Shan W.-Y., Lu H.-Z. Topological insulator and the Dirac equation // [SPIN](#). 2011. Vol. 1, no. 01. P. 33.
94. Isaev L., Moon Y. H., Ortiz G. Bulk-boundary correspondence in three-dimensional topological insulators // [Phys. Rev. B](#). 2011. Vol. 84, no. 7. P. 075444.
95. Sommerfeld A. Transmission of electrodynamic waves along a cylindrical conductor // *Annalen der Physik und Chemie*. 1899. Vol. 67. P. 233.
96. Abramowitz M., Stegun I. A. Handbook of Mathematical Function with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables // National Bureau of Standards, Applied Mathematics Series. 1970. Vol. 55.
97. Ehrenreich H., Cohen M. H. Self-Consistent Field Approach to the Many-Electron Problem // [Phys. Rev.](#) 1959. Vol. 115, no. 4. P. 786.
98. Williams P. F., Bloch A. N. Self-consistent dielectric response of a quasi-one-dimensional metal at high frequencies // [Phys. Rev. B](#). 1974. Vol. 10, no. 3. P. 1097.

99. Das Sarma S., Lai W.-y. Screening and elementary excitations in narrow-channel semiconductor microstructures // *Phys. Rev. B*. 1985. Vol. 32, no. 2. P. 1401.
100. Goni A. R., Pinczuk A., Weiner J. S. et al. One-dimensional plasmon dispersion and dispersionless intersubband excitations in GaAs quantum wires // *Phys. Rev. Lett.* 1991. Vol. 67, no. 23. P. 3298.
101. Demel T., Heitmann D., Grambow P., Ploog K. One-dimensional plasmons in AlGaAs/GaAs quantum wires // *Phys. Rev. Lett.* 1991. Vol. 66, no. 20. P. 2657.
102. Kukushkin I. V., Smet J. H., Kovalskii V. A. et al. Spectrum of one-dimensional plasmons in a single stripe of two-dimensional electrons // *Phys. Rev. B*. 2005. Vol. 72. P. 161317.
103. Ковальский В. А., Кукушкин И. В., Ханнанов М. Н. и др. Измерение логарифмической составляющей дисперсии одномерного плазмона в узких одиночных полосках двумерных электронов // *Письма в ЖЭТФ*. 2006. Т. 84, № 10. С. 656.
104. Das Sarma S., Hwang E. H. Collective modes of the massless Dirac plasma // *Phys. Rev. Lett.* 2009. Vol. 102, no. 20. P. 206412.
105. van Ostaay J. A. M., Akhmerov A. R., Beenakker C. W. J., Wimmer M. Dirac boundary condition at the reconstructed zigzag edge of graphene // *Phys. Rev. B*. 2011. Vol. 84, no. 19. P. 195434.
106. Downing C. A., Pearce A. R., Churchill R. J., Portnoi M. E. Optimal traps in graphene // *Phys. Rev. B*. 2015. Vol. 92. P. 165401.
107. Shytov A. V., Katsnelson M. I., Levitov L. S. Atomic Collapse and Quasi-Rydberg States in Graphene // *Phys. Rev. Lett.* 2007. Vol. 99, no. 24. P. 5.

108. Wakabayashi K., Fujita M., Ajiki H., Sigrist M. Electronic and magnetic properties of nanographite ribbons // *Phys. Rev. B*. 1999. Vol. 59, no. 12. P. 8271.
109. Sasaki K.-i., Shimomura Y., Takane Y., Wakabayashi K. Hamiltonian Decomposition for Bulk and Surface States // *Phys. Rev. Lett.* 2009. Vol. 102, no. 14. P. 146806.
110. Уиттекер Э. Т., Ватсон Дж. Н. Курс современного анализа. Ч. 2. Трансцендентные функции // М.: Физматгиз. 1963.
111. Abanin D. A., Lee P. A., Levitov L. S. Spin-filtered edge states and quantum Hall effect in graphene // *Phys. Rev. Lett.* 2006. Vol. 96, no. 17. P. 176803.
112. Abanin D. A., Lee P. A., Levitov L. S. Charge and spin transport at the quantum Hall edge of graphene // *Solid state communications*. 2007. Vol. 143, no. 1. P. 77.
113. Delplace P., Montambaux G. WKB analysis of edge states in graphene in a strong magnetic field // *Phys. Rev. B*. 2010. Vol. 82, no. 20. P. 205412.
114. Halperin B. I. Quantized Hall conductance, current-carrying edge states, and the existence of extended states in a two-dimensional disordered potential // *Phys. Rev. B*. 1982. Vol. 25, no. 4. P. 2185.
115. Koshino M., Nakanishi T., Ando T. Interface Landau levels in graphene monolayer-bilayer junctions // *Phys. Rev. B*. 2010. Vol. 82, no. 20. P. 205436.
116. Еналдиев В. В. "Квантовая антиточка в графене". Выпускная бакалаврская квалификационная работа, МФТИ, г. Долгопрудный, 2010. рук. В.А. Волков.
117. Базь А. И., Зельдович Я. Б., Переломов А. М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. Наука, 1971.

118. Градштейн И. С., Рыжик И. М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: Наука, 1963.
119. Webb R. A., Washburn S., Umbach C. P., Laibowitz R. B. Observation of h/e Aharonov-Bohm Oscillations in Normal-Metal Rings // [Phys. Rev. Lett.](#) 1985. Vol. 54, no. 25. P. 2696.
120. Datta S., Melloch M. R., Bandyopadhyay S. et al. Novel Interference Effects between Parallel Quantum Wells // [Phys. Rev. Lett.](#) 1985. Vol. 55, no. 21. P. 2344.
121. Russo S., Oostinga J. B., Wehenkel D. et al. Observation of Aharonov-Bohm conductance oscillations in a graphene ring // [Phys. Rev. B.](#) 2008. Vol. 77, no. 8. P. 085413.
122. Huefner M., Molitor F., Jacobsen A. et al. Investigation of the Aharonov–Bohm effect in a gated graphene ring // [Physica status solidi \(b\)](#). 2009. Vol. 246, no. 11-12. P. 2756.
123. Huefner M., Molitor F., Jacobsen A. et al. The Aharonov–Bohm effect in a side-gated graphene ring // [New Journal of Physics](#). 2010. Vol. 12, no. 4. P. 043054.
124. Ford C. J. B., Simpson P. J., Zailer I. et al. Charging and double-frequency Aharonov-Bohm effects in an open system // [Phys. Rev. B.](#) 1994. Vol. 49. P. 17456.
125. Karakurt I., Goldman V. J., Liu J., Zaslavsky A. Absence of Compressible Edge Channel Rings in Quantum Antidots // [Phys. Rev. Lett.](#) 2001. Vol. 87, no. 14. P. 146801.
126. Sim H.-S., Kataoka M., Yi H. et al. Coulomb Blockade and Kondo Effect in a Quantum Hall Antidot // [Phys. Rev. Lett.](#) 2003. Vol. 91, no. 26. P. 266801.

127. Weiss D., Richter K., Menshig A. et al. Quantized periodic orbits in large antidot arrays // [Phys. Rev. Lett.](#) 1993. Vol. 70, no. 26. P. 4118.
128. Kato M., Endo A., Katsumoto S., Iye Y. Aharonov-Bohm-type oscillations in antidot lattices in the quantum Hall regime // [Phys. Rev. B.](#) 2008. Vol. 77, no. 15. P. 155318.
129. Shen T., Wu Y. Q., Capano M. A. et al. Magnetoconductance oscillations in graphene antidot arrays // [Applied Physics Letters.](#) 2008. Vol. 93, no. 12. P. 122102.
130. Латышев Ю. И., Латышев А. Ю., Орлов А. П. и др. Периодические по полю осцилляции магнетосопротивления тонких монокристаллов графита с колоннообразными дефектами // [Письма в ЖЭТФ.](#) 2009. Т. 90, № 6. С. 526.
131. Büttiker M. Absence of backscattering in the quantum Hall effect in multiprobe conductors // [Phys. Rev. B.](#) 1988. Vol. 38, no. 14. P. 9375.
132. Schnez S., Ensslin K., Sigrist M., Ihn T. Analytic model of the energy spectrum of a graphene quantum dot in a perpendicular magnetic field // [Phys. Rev. B.](#) 2008. Vol. 78, no. 19. P. 195427.
133. Basko D. Resonant low-energy electron scattering on short-range impurities in graphene // [Phys. Rev. B.](#) 2008. Vol. 78. P. 115432.
134. Landau L., Lifshitz E. Quantum Mechanics. Pergamon, London, 1977.
135. Medhi A., Shenoy V. B. Continuum theory of edge states of topological insulators: variational principle and boundary conditions // [J. Phys.: Condens. Matter.](#) 2012. Vol. 24, no. 35. P. 355001.
136. Li Q. P., Das Sarma S., Joynt R. Elementary excitations in one-dimensional quantum wires: Exact equivalence between the random-phase approximation

and the Tomonaga-Luttinger model // [Phys. Rev. B](#). 1992. Vol. 45, no. 23. P. 13713.

137. Чаплик А. В. Возможная кристаллизация носителей заряда в инверсионных слоях низкой плотности // [ЖЭТФ](#). 1972. Т. 62. С. 746.
138. Zhou B., Lu H.-Z., Chu R.-L. et al. Finite Size Effects on Helical Edge States in a Quantum Spin-Hall System // [Phys. Rev. Lett.](#) 2008. Vol. 101, no. 24. P. 246807.

Приложение А

Граничное условие для нейтрино Вейля

В двухзонном однодолинном приближении графен описывается 2D гамильтонианом Вейля:

$$H_w = v\sigma\mathbf{p}, \quad (\text{A.1})$$

Следуя общим рассуждениям работ [49, 72] потребуем его эрмитовости в области с границей S и вектором нормали к границе $\mathbf{n} = (\cos \alpha, \sin \alpha)$. Говоря более строго, чтобы найти ГУ построим самосопряженное расширение гамильтониана. Для любой пары спиноров $\varphi = (\varphi_1, \varphi_2)^T$, $\psi = (\psi_1, \psi_2)^T$ должно быть выполнено:

$$\begin{aligned} \langle \varphi | H_w | \psi \rangle &= \int_V \varphi^+(\mathbf{r}) H_w \psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \langle \psi | H_w | \varphi \rangle^* - i\hbar v \int_S \varphi^+(\mathbf{r}) \sigma \mathbf{n} \psi(\mathbf{r}) dS = \\ &= \langle \psi | H_w | \varphi \rangle^* . \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Отсюда следует, что:

$$\varphi^+(\mathbf{r}) \sigma \mathbf{n} \psi(\mathbf{r}) \Big|_S = 0, \quad (\text{A.3})$$

из которого получаем ГУ:

$$(\psi_1 + ia e^{-i\alpha} \psi_2) \Big|_S = 0, \quad (\text{A.4})$$

В ГУ содержится неизвестный и произвольный безразмерный действительный параметр $a \in (-\infty, \infty)$. Иногда удобно записывать ГУ через параметр-угол γ :

$$\left(\psi_1 + i \cot \left(\frac{\gamma}{2} \right) e^{-i\alpha} \psi_2 \right) \Big|_S = 0. \quad (\text{A.5})$$

Котангенс \cot введен для упрощения дальнейших записей. Договоримся считать, что $\gamma \in [0, 2\pi)$.

Уравнение Вейля само по себе не инвариантно относительно инверсии времени, задаваемой оператором $T_w = i\sigma_2 K_0$, где K_0 — комплексное сопряжение.

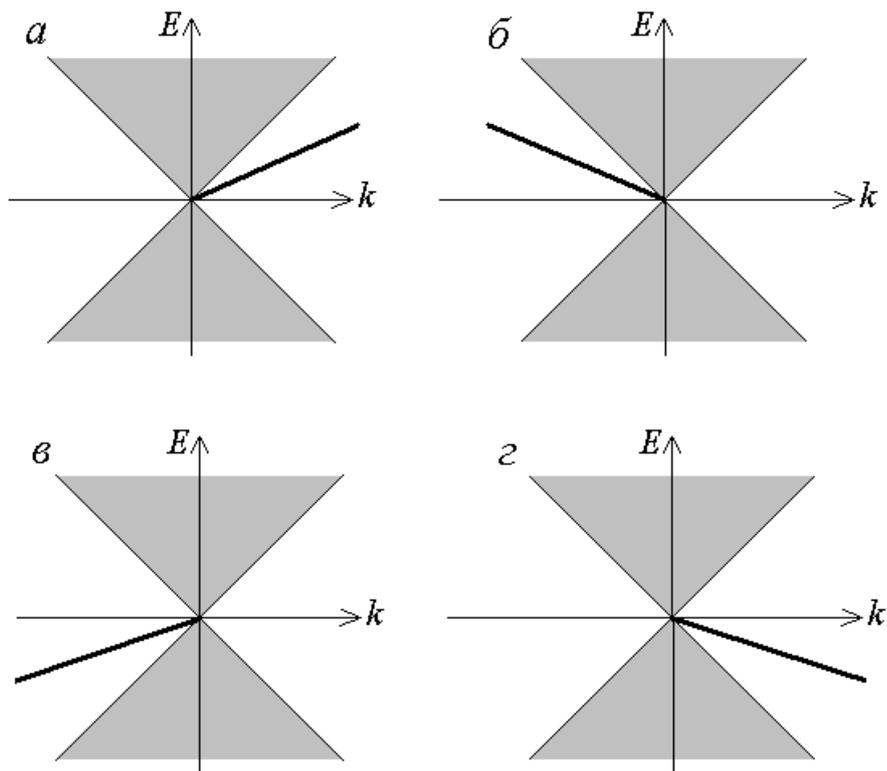


Рис. А.1. Электронный спектр $E(k)$ 2D нейтрино Вейля на полуплоскости. Закрашенная область отвечает непрерывному спектру (объемные решения), жирные прямые - краевым состояниям, которые существуют в разных квадрантах в зависимости от параметра a : а. $a \in (0, 1)$, б. $a \in (-\infty, -1)$, в. $a \in (1, \infty)$, г. $a \in (0, -1)$.

Поэтому не следует требовать и от ГУ инвариантности по отношению к инверсии времени.

ГУ (A.5) было получено в работе [72], но в ней авторы, используя наводящие соображения, выбрали $\gamma = \pi/2$, тем самым избавившись от краевых состояний.

Решим стационарное 2D уравнение Вейля с выведенным ГУ на полуплоскости $x > 0$. Будем считать параметр a постоянным вдоль границы и поэтому импульс вдоль границы $\hbar k$ сохраняющимся. Среди решений есть решения в виде падающих и отраженных от границы плоских волн, отвечающие объемному спектру (закрашенная область на рис. A.1), и краевые, волновая функция которых экспоненциально падает при $x > 0$. Спектр КС описывается уравнением:

$$E(k) = c^* \hbar k \frac{2a}{1 + a^2}, \quad k(1 - a^2) \geq 0. \quad (\text{A.6})$$

Зона КС представляет собой луч, рис. A.1, начинающийся при $k = 0$. В зависимости от параметра a , она существует в различных квадрантах плоскости (E, k) . КС киральные, т.е. не симметричны относительно $k = 0$, что является следствием отсутствия у гамильтониана (A.1) симметрии по отношению к инверсии времени.

Приложение Б

Оператор инверсии времени в графене

При учете междолинного расстояния в графене, оператор инверсии времени можно легко получить с помощью следующего трюка. Во-первых, он должен содержать комплексное сопряжение K_0 . Будем искать его в виде:

$$\hat{T}_{gr} = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \hat{K}_0. \quad (\text{Б.1})$$

Из условия коммутации оператора обращения времени \hat{T}_{gr} и гамильтонианом (1.2)

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \hat{K}_0 \begin{pmatrix} \sigma(\mathbf{p} - \mathbf{p}_0) & 0 \\ 0 & -\sigma(\mathbf{p} + \mathbf{p}_0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma(\mathbf{p} - \mathbf{p}_0) & 0 \\ 0 & -\sigma(\mathbf{p} + \mathbf{p}_0) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \hat{K}_0. \quad (\text{Б.2})$$

следует вид оператора обращения времени

$$\hat{T}_{gr} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 \\ \sigma_1 & 0 \end{pmatrix} \hat{K}_0. \quad (\text{Б.3})$$