Письма в ЖЭТФ, том 119, вып. 12, с. 904 – 908 © 2024 г. 25 июня

Индуцированная беспорядком сингулярность квантовой метрики

З. З. Алисултанов[1)]

Московский физико-технический институт (МФТИ, Физтех),
Центр теоретической физики им. А. А. Абрикосова, 141701 Долгопрудный, Россия

Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра РАН, 367015 Махачкала, Россия

Поступила в редакцию 3 мая 2024 г.
После переработки 5 мая 2024 г.
Принята к публикации 6 мая 2024 г.

Квантовый вес – это новая концепция для описания щелевых электронных состояний материи. Эта величина получается при интегрировании квантовой метрики (вещественной части квантового метрического тензора) по аналогии с тем, как фаза Берри получается при интегрировании кривизны Берри (мнимой части квантового метрического тензора). Квантовый вес определяет ряд кинетических величин таких, как нелинейный аномальный эффект Холла, оптическая проводимость, фотовольтаический эффект и т.д. В этой работе мы показали, что немагнитный беспорядок в топологических изоляторах может индуцировать сингулярность квантовой метрики и квантового веса.

DOI: 10.31857/S1234567824120061, EDN: QGGRZJ

Исследование топологических особенностей материи остается актуальным направлением физики конденсированного состояния [1–10]. В последнее время помимо топологических свойств активно изучаются геометрические свойства, гильбертова пространства зонных электронов и их связь с топологией [11]. Хотя основные квантово-метрические особенности конденсированных сред были изучены еще достаточно давно (см., например, [12, 13]), активные исследования начались только сейчас, когда появились прямые экспериментальные наблюдения. Одной из новых концепций, предложенных для описания щелевых состояний, является квантовый вес [14, 15]. Эта величина является фундаментальным свойством щелевых фаз и определяется квантовыми флуктуациями центра масс электрона. Квантовый вес связан с так называемой квантовой метрикой и позволяет интерпретировать нелинейный аномальный эффект Холла [16], наблюдавшийся недавно в системах, в которых кривизна Берри тождественно равна нулю. В настоящей работе мы показали, что немагнитный беспорядок может индуцировать сингулярность квантовой метрики, а следовательно, и величины квантового веса.

Геометрические и топологические свойства зоны Бриллюэна в общем случае могут быть получены рассматривая отображение вариации параметров гамильтониана внутри многообразия данного квантового состояния (зоны) на гильбертово пространство системы. Пусть $|u_{n,\mathbf{p}}\rangle$ соответствует n-й зоне в зоне Бриллюэна в точке $\mathbf{p}$. Введем метрику стандартным образом, рассматривая квадрат расстояния в гильбертовом пространстве между точками $|u_{n,\mathbf{p}}\rangle$ и $|u_{n,\mathbf{p}+d\mathbf{p}}\rangle$:

$$\left\| |u_{n,\mathbf{p}+d\mathbf{p}}\rangle - |u_{n,\mathbf{p}}\rangle \right\|^2 = \mathcal{T}_{ij} dp_i dp_j, \tag{1}$$

где

$$\mathcal{T}_{ij} = \left\langle \partial_{p_i} u_{n,\mathbf{p}} | \partial_{p_j} u_{n,\mathbf{p}} \right\rangle - \\ - \left\langle \partial_{p_i} u_{n,\mathbf{p}} | u_{n,\mathbf{p}} \right\rangle \left\langle u_{n,\mathbf{p}} | \partial_{p_j} u_{n,\mathbf{p}} \right\rangle = g_{ij} - \frac{i}{2}\Omega_{ij}, \tag{2}$$

где $\mathcal{T}_{ij}$ – это калибровочно инвариантный квантовый метрический тензор, $\Omega_{ij} = -2\mathrm{Im}\mathcal{T}_{ij}$ есть кривизна Берри, а $g_{ij} = \mathrm{Re}\mathcal{T}_{ij}$ есть квантовая метрика. Эта величина может оставаться нетривиальной даже при нулевой кривизне Берри. Например, в работе [16] был исследован эффект Холла в $\mathcal{PT}$-симметричной многослойной системе. $\mathcal{PT}$-симметричность приводит к тому, что кривизна Берри такой системы тождественно равна нулю. Тем не менее в такой системе наблюдался нелинейный аномальный квантовый эффект Холла, происхождение которого связано с наличием нетривиальной квантовой метрики. Этот эффект наблюдался также в работах [17, 18] в симметричных относительно обращения времени системах.

Квантовым весом D-мерной системы называется следующая величина

$$K_{ij} = 2\pi \int \frac{d^D\mathbf{k}}{(2\pi)^D} g_{ij}, \tag{3}$$

1) e-mail: zaur0102@gmail.com

наподобие тому, как фаза Берри и число Черна определяются интегрированием кривизны Берри. Эта величина введена в недавней работе [14]. Она связана с моментом минус первого порядка оптической проводимости. На микроскопическом уровне квантовый вес определяется квантовыми флуктуациями центра масс электрона [15]. Действительно, например, в одномерном случае имеем $g_{xx} = \langle \partial_{p_x} u | \partial_{p_x} u \rangle - \langle \partial_{p_x} u | u \rangle \langle u | \partial_{p_x} u \rangle$. Тогда $K_{xx} = \int dk g_{xx} \sim \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \langle \Delta x^2 \rangle$. Необходимо отметить, что число Черна может обращаться в нуль, а также быть положительным и отрицательным. Кривизна Берри, как уже отмечалось выше, обращается в нуль, если система обладает симметрией относительно обращения времени и инверсии. В отличие от этого, квантовая метрика и квантовый вес всегда неотрицательны. Предельный случай, когда квантовый вес равен нулю, соответствует абсолютно тривиальной системе – топологические числа в таком случае в принципе не могут быть отличны от нуля. Зонные диэлектрики характеризуются малыми значениями квантового веса, в то время как для топологических изоляторов эта величина большая [14]. Наконец, квантовый вес определяет фундаментальное ограничение величины топологической щели (массы) [14].

Вычислим квантовую метрику и квантовый вес для полупроводниковой системы при наличии немагнитного беспорядка. Следуя работам [2, 19, 20], мы используем для топологического изолятора с беспорядком следующий 4- зонный гамильтониан для кубической решетки (для простоты постоянная решетки положена равной единице)

$$H_{TI} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \left[\sum_{\mu=0}^{D} d_{\mu}(\mathbf{k}) \Gamma_{\mu} + d_4(\mathbf{k}) \mathbb{I} \right] \Psi_{\mathbf{k}} + \sum_j U_j \Psi_j^{\dagger} \Psi_j, \tag{4}$$

где Ψ_j – 4-компонентный вектор состояния в j-м узле кристаллической решетки, $d_0(\mathbf{k}) = \chi - 2t \sum_i \cos k_i$, $d_i(\mathbf{k}) = -2\lambda \sin k_i$, $d_4(\mathbf{k}) = 2\gamma \sum_i (1 - \cos k_i)$, Γ_μ – матрицы Дирака, U_j – случайный потенциал в j-м узле решетки, вызванный беспорядком. Мы используем простейшую модель Андерсона, в рамках которой значения энергии в узлах распределены равномерно с плотностью $1/U_0$ в интервале $[-U_0/2, U_0/2]$.

При $U_0 = 0$ получаем гамильтониан чистой системы $H_{TI}^0 = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} H_{\mathbf{k}}^0 \Psi_{\mathbf{k}}$. Этот гамильтониан содержит член $m = \chi - 6t$, называемый топологической массой. Можно показать, что при $m > 0$ система представляет собой обычный зонный изолятор с величиной щели, равной m. Если $m < 0$, то спектр становится инвертированным и система, помимо объемных состояний с щелями, содержит еще и бесщелевые краевые состояния, обладающие топологической защитой. Эта фаза называется топологическим изолятором. Обратим внимание, что при $U_0 = 0$ гамильтониан инвариантен относительно обращения времени, поскольку $\mathcal{T}\Gamma_0\mathcal{T}^{-1} = \Gamma_0$, $\mathcal{T}\Gamma_i\mathcal{T}^{-1} = -\Gamma_i$, $d_i(-\mathbf{k}) = -d_i(\mathbf{k})$, где $\mathcal{T}$ – оператор обращения времени. Эта инвариантность является основой топологической защиты киральных краевых состояний.

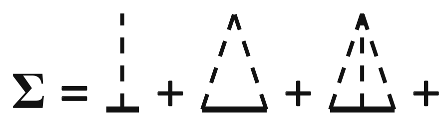

Рис. 1. Диаграммный ряд для собственно-энергетической части (5) в одноприместной крестовой технике в приближении T-матрицы рассеяния

Топологическая масса $m = \chi - 6t$ получилась в нулевом порядке разложения функции $d_0(\mathbf{k})$ в ряд Тейлора вблизи $\mathbf{k} = 0$. Во втором порядке возникает квадратичная добавка tk^2, играющая важную роль для топологической классификации. При наличии беспорядка (в нашей модели это означает, что $U_0 \neq 0$) этот член оказывается еще более существенным. Действительно, беспорядок приводит к пространственной локализации состояний, когда волновые функции с данным испульсом "живут" в конечной области размером порядка длины свободного пробега и экспоненциально спадают вне ее: $\psi \sim \exp -r/r_0$. Наличие квадратичного члена приводит к поправке $-t\nabla^2\psi = -tr_0^{-2}\psi$ к топологической массе. Эта отрицательная поправка может превзойти величину $m > 0$, что приведет к смене знака, т.е. инверсии спектра. Этот эффект играет ключевую роль в установлении так называемой фазы андерсоновского топологического изолятора [20–22]. Связанная с беспорядком сингулярность квантовой метрики, изучаемая в нашей работе, также основана на этом эффекте.

При $U_0 \neq 0$ спектр системы перенормируется. В рамках метода одноузельных диаграмм [23–25] (однокрестовая техника) собственную энергетическую часть можно изобразить, как показано на рис. 1. Использование такого диаграммного ряда означает выход за рамки борновского приближения. Это устраняет некоторые полюса в выражениях и дает более точные результаты. Приближение Борна можно применить, если выполняется условие $k_F^3 \int u(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \ll \epsilon_F$ (см., например, [26]). Если предположить, что примесный потенциал равен u_0 в области $\Delta^3\mathbf{r}$ и близок к нулю в остальном пространстве, то этот критерий можно переписать как $\Delta^3\mathbf{r} \ll \epsilon_F/u_0 k_F^3 \simeq$

$1/\left(u_0\,(2m)^{3/2}\,\epsilon_F^{1/2}\right)$. Таким образом, критерий выполняется при короткодействующем потенциале и малых значениях энергии Ферми и топологической массы. Это важно, поскольку переход от топологически тривиальной фазы с $m > 0$ к топологически нетривиальной фазе с $m < 0$ осуществляется через значение $m = 0$. Также следует отметить, что мы не учитываем диаграммы с пересечениями от нескольких примесей. Малость таких диаграмм оценивается как $\hbar/\epsilon_F\tau \gg 1$ [26]. Это условие можно интерпретировать следующим образом: чем меньше время релаксации τ, тем больший диффузионный объем охватывает частица и тем меньше вероятность возвращения частицы в исходную точку. Будем считать, что оба упомянутых критерия (применимость борновского приближения и пренебрежение пересекающимися диаграммами) в нашей системе выполняются. Таким образом, диаграммный ряд на рис. 1 можно суммировать в приближении короткодействующего примесного центра, когда преобразование Фурье потенциала примеси можно рассматривать как константу. В этом случае

$$\hat{\Sigma}\,(\epsilon_F) = U\left(1 - U\sum_{BZ}\hat{G}\,(\epsilon_F,\mathbf{k})\right)^{-1}, \qquad (5)$$

где $\hat{G}_{\mathbf{k}}\,(\epsilon_F) = \left(\epsilon_F + i\delta - H^0_{\mathbf{k}} - \Sigma\right)^{-1}$. Усреднение по беспорядку дает

$$\hat{\Sigma} = -\frac{\left(\hat{F}^{-1}\right)^2}{U_0}\ln\frac{1-\frac{U_0}{2}\hat{F}}{1+\frac{U_0}{2}\hat{F}} - \hat{F}^{-1}, \qquad (6)$$

где введены следующие обозначения: $\hat{F} = \sum_{BZ}\hat{G}_{\mathbf{k}}$ и $\hat{F}^{-1}\hat{F} = \mathbb{I}$. Матричная структура гамильтониана приводит к аналогичной структуре собственной энергетической части. Следовательно, последние можно разложить на основе матриц Дирака $\Sigma = \sum_\mu \Gamma_\mu\Sigma_\mu + \mathbb{I}\Sigma_4$, где $\Sigma_\mu = 1/4\mathrm{tr}\,(\Gamma_\mu\Sigma)$, $\Sigma_4 = 1/4\mathrm{tr}\Sigma$. Рассмотрим случай немагнитных примесей. Это означает, что полный гамильтониан (4) также должен быть T-инвариантным. Таким образом, $\mathcal{T}\Sigma\mathcal{T}^{-1} = \Sigma$ или $\mathcal{T}\Sigma_i\mathcal{T}^{-1} = -\Sigma$. Однако величины Σ_μ являются функциями только энергии и не зависят от импульса. Поэтому $\mathcal{T}\,(d_i\,(\mathbf{k}) + \Sigma_i)\,\mathcal{T}^{-1} = -d_i\,(\mathbf{k}) + \Sigma_i$ должно быть правдой. Если учесть, что $\mathcal{T}\Gamma_i\mathcal{T}^{-1} = -\Gamma_i$, то в итоге получим $\Sigma_i \equiv 0$. Таким образом, немагнитные примеси приводят к перенормировке топологической массы и энергии Ферми за счет величин Σ_0 и Σ_4 соответственно. Нас интересует перенормировка массы: $m \to \overline{m} = m + \mathrm{Re}\,[\Sigma_0]$. Разложение функции (6) по U_0F до второго порядка дает самосогласованное борновское приближение $\Sigma = \left(U_0^2/12\right)F$, использованное в работах [20–22]. Далее, для получения аналитических выражений упростим задачу и положим $\hat{G}_{\mathbf{k}} \to \hat{G}^0_{\mathbf{k}}$, где $\hat{G}^0_{\mathbf{k}} = \left(\epsilon_F + i\delta - H^0_{\mathbf{k}}\right)^{-1}$. Тогда, используя те же соображения, что и в работах [20–22] для вычисления $\sum_{BZ}\hat{G}^0_{\mathbf{k}}$, получаем (энергия Ферми локализована внутри щели, поэтому мнимая часть F, представляющая собой плотность объемных состояний чистой системы, равна нулю при нулевой температуре):

$$\mathrm{Re}\,[F] = F_0\Gamma_0 + F_1, \qquad (7)$$

$$F_0^{3D} \simeq -\frac{1}{2\pi}\frac{t}{t^2-\gamma^2}, F_1^{3D} = -F_0^{3D}\,(t \rightleftharpoons \gamma)\,, \qquad (8)$$

$$F_0^{2D} \simeq -\frac{1}{4\pi}\frac{t}{t^2-\gamma^2}\ln\left|\frac{t^2-\gamma^2}{\epsilon_F^2-m^2}\right|, \qquad (9)$$

$$F_1^{2D} = F_0^{2D}\,(t \rightleftharpoons \gamma)\,. \qquad (10)$$

Задачу нахождения величин Σ_μ можно упростить, если сначала установить их вид в выражении (5), а затем провести усреднение по примесям. В результате мы получаем

$$\Sigma_0 = -\frac{F_0}{F_0^2-F_1^2} + \qquad (11)$$

$$+\frac{1}{U_0}\frac{F_0F_1}{\left(F_0^2-F_1^2\right)^2}\ln\left|\frac{\left(\frac{U_0\left(F_0^2-F_1^2\right)}{2}+F_1\right)^2-F_0^2}{\left(\frac{U_0\left(F_0^2-F_1^2\right)}{2}-F_1\right)^2-F_0^2}\right| +$$

$$+\frac{1}{2U_0}\frac{F_0^2+F_1^2}{\left(F_0^2-F_1^2\right)^2}\ln\left|\frac{\left(\frac{U_0\left(F_0^2-F_1^2\right)}{2}+F_0\right)^2-F_1^2}{\left(\frac{U_0\left(F_0^2-F_1^2\right)}{2}-F_0\right)^2-F_1^2}\right|.$$

Чтобы получить формулу (11), мы положили $\hat{G}_{\mathbf{k}} \to \hat{G}^0_{\mathbf{k}}$ в (5) и использовали выражение (7). После этого мы умножили матрицу (5) на Γ_0 и вычислили след. Полученное выражение проинтегрировано в интервале $[-U_0/2, U_0/2]$ с весом $1/U_0$. Те же выражения можно получить, если найти $\mathrm{tr}\,(\Gamma_\mu\Sigma)$ из формулы (6). Обратите внимание, что в отличие от борновского приближения, используемого в работах [20–22], выражение (11) для собственной энергетической части не содержит особенности в точке $t = \gamma$. Это связано с тем, что мы суммировали всю серию диаграмм (см. рис. 1).

Основной результат данной работы основан на зависимости $\overline{m}\,(U_0)$. В трехмерном зонном изоляторе $(m > 0)$ переход в топологическую фазу происходит через закрытие щели $(U_0^2 > 24\pi m\left(t^2-\gamma^2\right)/t)$. Обозначим в общем случае через U_c значение U_0, при котором топологическая масса обращается в нуль, т.е. $\overline{m}(U_c) = 0$.

Итак, для перенормированной энергии вблизи $\mathbf{k} = 0$ мы имеем (мы опускаем для простоты квадратичный член в $\overline{m}$, так как он уже учтен при перенормировке)

$$\overline{E}_{k\pm} \approx \pm\sqrt{\overline{m}^2(U_0) + v^2k^2}, \qquad (12)$$

и, соответственно, гамильтониан можно записать как

$$\overline{H}(\mathbf{k}) = \overline{E}_{k+}\sum_{\mu=0}^{D} n^{\mu}_{\mathbf{k}}\Gamma_{\mu} \qquad (13)$$

где $n^{\mu}_{\mathbf{k}}$ есть единичный вектор вдоль оси μ.

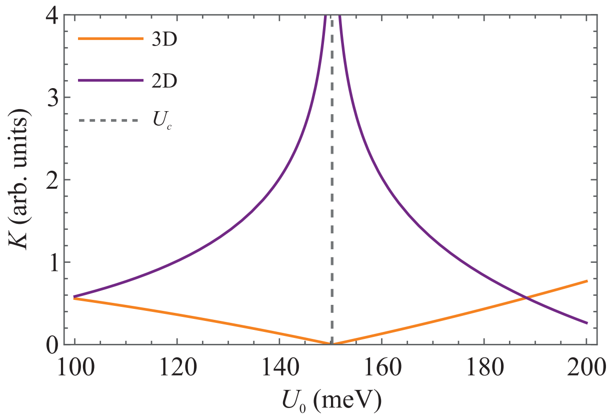

Рис. 2. (Цветной онлайн) Асимптотическая зависимость квантового веса от величины U_0 вблизи критического значения. Параметры гамильтонианов для 2D и 3D случаев взяты из [20–22]

Далее, будем следовать логике работы [14] (см. формулы (29), (30) этой работы). Ясно, что при $U_0 \to U_c$ квантовая метрика расходится как $1/k^2$ вблизи $k = 0$. На рисунке 2 показана асимптотическая зависимость квантового веса от величины U_0 вблизи критического значения. Видно, что в двумерном случае квантовый вес расходится при $U_0 \to U_c$. Зависимость квантового веса от U_0 вблизи критического значения можно оценить как: $K \sim \ln|\partial\overline{m}/\partial U_0| + \ln|U_0 - U_c|$.

Очевидно, что эти выводы могут быть обобщены на все величины, которые определяются квантовым весом. Одной из таких величин является обобщенный оптический вес [14]. Таким образом, немагнитный беспорядок в двумерной системе вблизи критического значения индуцирует сильное оптическое поглощение низкоэнергетических фотонов. Этот эффект можно использовать для экспериментальной идентификации перехода в фазу андерсоновского топологического изолятора.

Наконец отметим, что интересно рассмотреть квантовую метрику для неэрмитовых систем (см., например, [27, 28]), в том числе слоистых (см. [29, 30]). Для слоистых систем в связи с квантово-метрическими эффектами особенно следует отметить работу [31], в которой рассмотрен размерный кроссовер в слоистой топологической системе. Связанные с перекрытием блоховских зон неэрмитовы эффекты могут привести к усилению эффектов квантовой метрики. Эти эффекты проявляются в кинетической теории в виде нелинейного холловского отклика.

Финансирование работы. Часть работы, связанная с расчетом квантового веса и приложением к неэрмитовым системам финансировалась за счет средств Российского научного фонда (проект 22-72-00110), а часть, связанная с расчетом гамильтониана с беспорядком финансировалась за счет бюджета института (Госзадание ФСМГ-2023-0011).

Конфликт интересов. Автор данной работы заявляет, что у него нет конфликта интересов.

---

1. M. Z. Hasan and C. L. Kane, Rev. Mod. Phys. **82**, 3045 (2010).
2. X. L. Qi, T. Hughes, and S.-C. Zhang, Phys. Rev. B **78**, 195424 (2008).
3. T. T. Heikkila, N. B. Kopnin, and G. E. Volovik, JETP Lett. **94**, 233 (2011).
4. N. P. Armitage, E. J. Mele, and A. Vishwanath, Rev. Mod. Phys. **90**, 015001 (2018).
5. J. Nissinen and G. E. Volovik, JETP Lett. **110**, 789 (2019).
6. A. Anirban, Nat. Rev. Phys. **5**, 267 (2023).
7. Y. Tokura, Nat. Rev. Phys. **5**, 439 (2023).
8. H. C. Wu, H. S. Xu, L. C. Xie, and L. Jin, Phys. Rev. Lett. **132**, 083801 (2024).
9. H. C. Wu, L. Jin, and Z. Song, Phys. Rev. B **103**, 235110 (2021).
10. H. Park, J. Cai, E. Anderson, Y. Zhang, J. Zhu, X. Liu, C. Wang, W. Holtzmann, C. Hu, Z. Liu, T. Taniguchi, K. Watanabe, J.-H. Chu, T. Cao, L. Fu, W. Yao, C.-Z. Chang, D. Cobden, D. Xiao, and X. Xu, Nature **622**, 74 (2023).
11. P. Törmä, Phys. Rev. Lett. **131**, 240001 (2023).
12. G. E. Volovik, JETP Lett. **46**, 98 (1987).
13. N. Marzari and D. Vanderbilt, Phys. Rev. B **56**, 12847 (1997).
14. Y. Onishi and L. Fu, Phys. Rev. X **14**, 011052 (2024).
15. Y. Onishi and L. Fu, arXiv:2401.13847 (2024).
16. A. Gao, Y.-F. Liu, J.-X. Qiu et al. (Collaboration), Science **381**, 181 (2023).

17. Q. Ma, S.-Y. Xu, H. Shen et. al. (Collaboration), Nature **565**, 337 (2019).
18. N. Wang, D. Kaplan, Z. Zhang, et al. (Collaboration), Nature **621**, 487 (2023).
19. P. Hosur, S. Ryu, and A. Vishwanath, Phys. Rev. B **81**, 045120 (2010).
20. H.-M. Guo, G. Rosenberg, G. Refael, and M. Franz, Phys. Rev. Lett. **105**, 216601 (2010).
21. J. Liu, R. L. Chu, J. K. Jain, and S.-Q. Shen, Phys. Rev. Lett. **102**, 136806 (2009).
22. C. W. Groth, M. Wimmer, A. R. Akhmerov, J. T. Lo, and C. W. J. Beenakker, Phys. Rev. Lett. **103**, 196805 (2009).
23. A. A. Abrikosov and L. P. Gor'kov, JETP **8**, 1090 (1959).
24. A. A. Abrikosov and L. P. Gor'kov, JETP **9**, 220 (1959).
25. S. F. Edwards, Phyl. Mag. **3**, 1020 (1958).
26. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Физматгиз, М. (1962), 443 с.
27. Z. Z. Alisultanov and E. G. Idrisov, Phys. Rev. B **107**, 085135 (2023).
28. З. З. Алисултанов, Н. А. Демиров, Письма в ЖЭТФ **117**, 777 (2023).
29. Z. Z. Alisultanov, G. O. Abdullaev, P. D. Grigoriev, and N. A. Demirov, JETP **136**, 353 (2023).
30. Z. Z. Alisultanov and A. Kudlis, Phys. Rev. B **109**, 165141 (2024).
31. T. T. Heikkila and G. E. Volovik, JETP Lett. **93**, 59 (2011).