

Квазиклассическое рассеяние на краевых дефектах в топологических изоляторах в магнитном поле¹⁾

А. Ш. Дотдаев⁺, Я. И. Родионов^{*2)}, А. В. Рожков^{*}, П. Д. Григорьев[×]

⁺Национальный исследовательский технологический университет “МИСИС”, 119049 Москва, Россия

^{*}Институт теоретической и прикладной электродинамики, 125412 Москва, Россия

[×]Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау, 117940 Москва, Россия

Поступила в редакцию 28 августа 2024 г.

После переработки 19 сентября 2024 г.

Принята к публикации 21 сентября 2024 г.

Для электронов, распространяющихся по краевым состояниям двухмерного (2D) топологического изолятора, мы изучаем рассеяние на краевых дефектах, неизбежно присутствующих в реалистичных образцах 2D топологического изолятора, в присутствии внешнего однородного магнитного поля. Магнитное поле нарушает симметрию обращения времени, разрушая топологическую защиту фермионных состояний. Независимо от формы краевой деформации и величины магнитного поля, рассеяние всегда является надбарьерным. В такой ситуации удобно воспользоваться квазиклассическим методом Покровского–Халатникова. Для широких классов аналитических профилей деформации это позволяет теоретически рассчитать не только основной экспоненциальный вклад в амплитуду рассеяния, но и предэкспоненциальный множитель.

DOI: 10.31857/S0370274X24110086, EDN: VLXZPB

1. Введение. Топологические изоляторы (ТИ) – это новые состояния квантовой материи, которые не могут быть адиабатически преобразованы в обычные изоляторы и полупроводники. Они характеризуются полной диэлектрической щелью в объеме и бесщелевыми состояниями, защищенными симметрией обращения времени (TR-симметрией), на краю или поверхности. Возможные применения ТИ включают маломощную электронику [1] и устойчивые к ошибкам квантовые вычисления [2, 3]. Значительный интерес научного сообщества к свойствам ТИ обусловлен тем, что удастся экспериментально наблюдать транспорт в краевых состояниях (в квантовых ямах HgTe) [4] и в поверхностных состояниях [5] (в кристаллах Bi₂Se₃ [6]). В большинстве случаев образцы 2D и 3D ТИ представляют собой разные соединения (исключением является HgTe [7]). Другие реализации одномерных топологически защищенных состояний включают состояния на краях между поверхностями трехмерного ТИ [8] и состояния, возникающие в ступенчатых краях [9, 10].

Главная особенность краевых состояний в 2D ТИ заключается в том, что из-за зацепления спина и

импульса, рассеяние (всегда являющееся рассеянием назад для краевых мод 2D ТИ) с неизбежностью сопровождается переворотом спина квазичастицы. Поэтому в отсутствие магнитных примесей упругое рассеяние краевых состояний строго запрещено. Таково замечательное проявление TR-симметрии для таких систем [11]. Важной особенностью всех ТИ является их сильное спин-орбитальное взаимодействие (СОВ), [12, 13]. Следует отметить, что в работе [14] уже исследовалось влияние инверсионной асимметрии интерфейса на краевые состояния в таких системах в поперечном магнитном поле. Однако в ней совершенно не учтены СОВ и влияние краевых деформаций. В этой статье мы предлагаем модельный краевой гамильтониан, описывающий влияние СОВ на краевые дефекты. В нашем подходе краевой дефект описывается профилем угла деформации (см. рис. 1). Упругое рассеяние становится возможным при наличии однородного магнитного поля, ортогонального кромке.

В нашей работе мы построим теорию рассеяния в такой системе для широких классов профилей деформации края. Особое внимание уделяется аналитической структуре решений соответствующего уравнения Дирака. Нами будут изучены два взаимодополняющих случая: квазиклассический режим, соответствующий гладкой деформации края, а так-

¹⁾См. дополнительный материал к данной статье на сайте нашего журнала www.jetpletters.ac.ru

²⁾e-mail: yaroslav.rodionov@gmail.com

же режим теории возмущений по малому внешнему магнитному полю. В тех ситуациях, когда параметры задачи допускают применение обоих этих подходов, мы убедимся в совпадении полученных ответов.

Наше исследование призвано пролить некоторый свет на то, как TR-симметрия влияет на аналитические свойства амплитуды рассеяния. В отсутствие магнитного поля удается найти точное решение для любого профиля деформационного потенциала. Для гладких профилей деформации используется метод Покровского–Халатникова (П-Х) [15], позволяющий получить аналитическое выражение для амплитуды отражения с предэкспоненциальной точностью.

2. Модель. Мы предполагаем следующую форму гамильтониана для электронов в двумерном ТИ:

$$\hat{H} = H_0 + H_{so}; \quad (1)$$

$$H_0 = v_{F0} \hat{p}_x \hat{\sigma}_y, \quad H_{so} = \alpha \boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\nu},$$

где H_0 – эффективный гамильтониан краевых состояний, движущихся вдоль оси x ($y = 0$) [16] и $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ – матрицы Паули, действующие в базе спина $1/2$. H_0 следует из особой зонной структуры, не зависящей от спин-орбитального взаимодействия, а v_{F0} представляет собой затравочную скорость Ферми.

Спин-орбитальный гамильтониан H_{so} написан стандартным образом для двумерного электронного газа [17]; $\mathbf{p}$ – импульс электронов, $\boldsymbol{\nu}$ – единичный вектор, перпендикулярный поверхности (или границе раздела в гетероструктуре), α – параметр Рашбы, зависящий от материала и внешнего электрического поля (затворного напряжения) [12, 13]. Последнее вызывает расщепление энергетических зон из-за спина электрона (расщепление Рашбы), что хорошо видно в зонной структуре ТИ-материалов [18, 13].

Здесь важно отметить, как правильно следует выбрать направление вектора нормали $\boldsymbol{\nu}$ в уравнении (1). В принципе, правильное направление можно определить из исходного гамильтониана ТИ, который мы здесь не приводим. Однако мы опираемся на результаты статьи [18], где показано, что скорость Ферми ТИ растет с уменьшением коэффициента Рашбы α . Как мы увидим ниже, правильное направление $\boldsymbol{\nu}$ соответствует указанному на рис. 1.

Теперь рассмотрим деформацию края, представленную на рис. 1. Профиль изгиба образца в плоскости yz определяется функцией $\phi(x)$. Это, в свою очередь, приводит к модификации спин-орбитального взаимодействия

$$H_{so} = -\alpha \hat{p}_x \hat{\sigma}_y + \hat{U}(x); \quad (2)$$

$$\hat{U}(x) = \frac{\alpha}{2} [\hat{p}_x \phi(x) + \phi(x) \hat{p}_x] \sigma_z$$

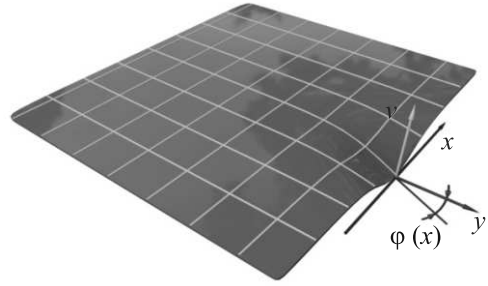


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схематическая иллюстрация геометрического дефекта края в образце 2D ТИ

для гладких и неглубоких деформаций ($\phi(x) \ll 1$). Здесь мы ввели антикоммутатор для сохранения эрмитовости исходного гамильтониана СОВ (1). Антикоммутатор необходим в силу того, что вектор нормали $\boldsymbol{\nu}$ теперь стал функцией координаты x . Первый член в (2), $-\alpha \hat{p}_x \hat{\sigma}_y$, как видно из исходного гамильтониана (1), просто перенормирует скорость Ферми. Последний член в (2) предполагается рассматривать как потенциальный профиль упругого рассеяния задачи. В дальнейшем было бы удобно включить в функцию профиля параметр $\hat{\alpha}$: $\varphi = \alpha \phi$.

Потенциальный профиль $\hat{U}$ в (2) сам по себе не приводит к рассеянию краевых состояний, поскольку не нарушает TR-симметрию. Однако, как мы увидим, в присутствии магнитного поля это не так. Приложим магнитное поле в направлении оси z (перпендикулярно плоскости образца топологического изолятора). Выберем следующую калибровку вектор-потенциала: $\mathbf{A} = (\mathcal{H}y, 0, 0)$. Координата y в нашем случае остается постоянной $y = \text{const}$, которую смело можно положить равной нулю (альтернативно, для постоянной y векторный потенциал можно убрать из уравнения Дирака с помощью тривиального калибровочного преобразования). Таким образом, единственным изменением эффективного гамильтониана является добавление взаимодействия спина с магнитным полем (зеemanовское слагаемое):

$$\hat{H}^{1D}(x) = v_F \hat{p}_x \sigma_y + \mu \sigma_z + \hat{U}(x), \quad (3)$$

где $v_F = v_{F0} - \alpha$ – перенормированная скорость Ферми, а $\mu = \mu_B g \mathcal{H}$, g – g -фактор для краевых электронов [19]. Мы прикладываем поперечное магнитное поле, ввиду того, что магнитное поле в плоскости не влияет на краевые состояния, поскольку соответствующий член в гамильтониане можно исключить калибровочным преобразованием операторов электронного поля [20].

Следовательно, нам необходимо решить задачу рассеяния для следующего уравнения Дирака:

$$\left[v_F \hat{p}_x \sigma_y + \mu \sigma_z + \hat{U}(x) \right] \psi(x) = \varepsilon \psi(x). \quad (4)$$

Легко видеть, что даже в отсутствие деформационного потенциала $\hat{U}(x)$ зеемановский член $\mu \sigma_z$ открывает щель в спектре краевого состояния ширины μ . Поэтому состояния рассеяния всегда имеют энергию больше μ и условие:

$$\varepsilon > \mu \quad (5)$$

предполагается всегда выполненным.

3. Методы. Уравнение Дирака (4) представляет собой систему двух дифференциальных уравнений первого порядка на дублет $\psi = (\psi_1, \psi_2)$. Самым простым и (неожиданно) удобным подходом к ее анализу оказалось приведение системы (4) к дифференциальному уравнению 2-го порядка относительно единственной функции ψ_1 :

$$2\hbar^2(\varphi^2 + 1)\alpha\psi_1'' + 2i\hbar[\hbar^2(\varphi^2 + 1)\varphi'' + \varphi\alpha(2\mu - 3i\hbar\varphi')]\psi_1' + \left[\frac{1}{2}\alpha\beta(\alpha - 2i\hbar\varphi') + 4\varepsilon\hbar^2\varphi\varphi'' \right]\psi_1 = 0, \quad (6)$$

$$\psi_2 = \frac{2\hbar(\varphi^2 + 1)\psi_1' - i\psi_1\varphi\beta(x)}{\alpha(x)}, \quad (7)$$

где $\alpha(x) = 2(\mu + \varepsilon) - i\hbar\varphi'$, $\beta(x) = 2(\mu - \varepsilon) + i\hbar\varphi'$.

Вывод (6) прост, промежуточные формулы для удобства читателя мы приводим в разделе А (см. дополнительные материалы). В дальнейшем мы будем называть это уравнение *уравнением Дирака*. Дифференциальное уравнение (6) не может быть решено точно. Мы проанализируем его в двух различных подходах:

(i) квазиклассический метод, отвечающий плавной деформации $\varphi(x)$ ребра;

(ii) теория возмущений по напряженности магнитного поля (зеемановской энергии) μ . Затем мы покажем, как эти два подхода прекрасно сшиваются.

3.1. Квазиклассическое приближение. Исследование уравнения 4 в квазиклассической парадигме требует указания малого параметра задачи. Физически, квазиклассический подход предполагает гладкость потенциальной системы.

В нашем случае роль потенциала играет профиль краевой деформации $\varphi(x)$. Соответствующий масштаб изменения потенциала обозначим a . Следовательно, гладкость потенциала означает, что дебройлевская длина волны $\hbar v_F / \varepsilon$ намного меньше a :

$$\frac{\lambda}{a} \equiv \frac{\hbar v_F}{\varepsilon a} \ll 1 \quad (\text{semiclassical approximation}). \quad (8)$$

Как мы увидим в дальнейшем анализе, структура квазиклассического рассеяния в задаче такова, что ввиду условия (5) квазиклассический импульс никогда не обращается в нуль на вещественной оси, что делает рассеяние всегда *надбарьерным* событием. Наиболее адекватным подходом к решению задачи о надбарьерном отражении является метод П-Х [15]. Далее для удобства мы будем использовать *естественные* единицы $\hbar = v_F = 1$, восстанавливая их там, где это необходимо.

3.2. Метод П-Х. Идею метода можно сформулировать следующей последовательностью шагов (см. также изящную работу М. Берри [21]):

(i) Выполнить аналитическое продолжение квазиклассического решения в комплексную плоскость по так называемой антистоксовой линии $\text{Im} \int_{z_0}^z k(z) dz = 0$, где $k(z)$ – квазиклассический импульс, а z_0 – точка поворота в комплексной плоскости.

(ii) Построить точное решение уравнения Шредингера в окрестности точки поворота z_0 (где импульс $k(z)$ можно разложить в ряд Тейлора, сильно упростив, таким образом, исходное уравнение).

(iii) Найти асимптотику точного решения на антистоксовых линиях, идущих вправо и влево от точки поворота.

(iv) Предполагая, что существует непустое пересечение области применимости асимптотик точного решения и квазиклассического решения (заштрихованная область на рис. 2), сшить их на антистоксовых линиях. (Задачу можно решить в квазиклассическом подходе тогда и только тогда, когда такое пересечение существует).

(v) Построить аналитическое продолжение решения с антистоксовой линии, идущей в $-\infty$, на вещественную ось $\psi(z) \rightarrow \psi(x)$.

Далее мы шаг за шагом будем реализовывать намеченную программу, объясняя все нюансы.

3.3. Квазиклассическое решение. Введем экспоненциальную замену $\psi \rightarrow e^{iS/\hbar}$ для волновой функции и используем стандартный квазиклассический аппарат, адаптированный к стационарному уравнению Дирака:

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad \psi_{1,2} = \exp \left(\frac{iS_0}{\hbar} + iS_{1,2} + \dots \right). \quad (9)$$

В нулевом порядке по $\hbar$ (или отбрасывая все члены с производными от φ в уравнении (6)) получаем следующее выражение для S_0 (см. дополнительные материалы, раздел А):

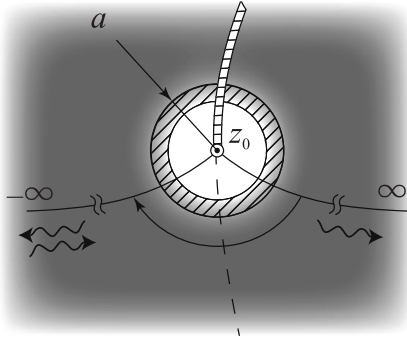


Рис. 2. К методу П-Х. Окрестность точки поворота z_0 со стандартным разрезом, идущим вверх. Серая область обозначает область применимости квазиклассического приближения (достигающую бесконечности в комплексной плоскости). Меньший круг радиуса a обозначает область применимости точного решения вблизи точки поворота. Две сплошные кривые, исходящие из точки поворота до $\pm\infty$, являются антистоксовыми линиями. Пунктирная линия – линия Стокса. Заштрихованная область – это область сосуществования квазиклассического и точного решения, в которых их можно считать

$$S_0(x) = \int^x q_{\pm}(x') dx', \quad (10)$$

$$q_{\pm} = \frac{-\mu\varphi \pm p}{\varphi^2 + 1}, \quad p = \sqrt{\varepsilon^2(\varphi^2 + 1) - \mu^2}, \quad (11)$$

где $q_{\pm}$ интерпретируется как квазиклассический импульс. Регулярная ветвь p выбирается таким образом, чтобы $p \xrightarrow{x \rightarrow +\infty} \sqrt{\varepsilon^2 - \mu^2}$. Затем, сохранив уже члены порядка $\hbar$ ($S_{1,2}$ в замене (9)) и подставив ее в (6), мы получим предэкспоненциальные квазиклассические члены для волновой функции ψ :

$$\begin{aligned} \psi_{1,\pm}(x) &= \xi_{1,\pm}(x) e^{\frac{i}{\hbar} \int q_{\pm} dx} \quad \xi_{1,\pm} = \sqrt{\pm q_{\pm} \left[1 \pm \frac{\varphi \varepsilon}{p} \right]} \\ \psi_{2,\pm}(x) &= -i \psi_{1,\pm} \frac{\varepsilon \varphi \mp p}{\varepsilon + \mu}. \end{aligned} \quad (12)$$

Опять же, внешние квадратные корни, входящие в определение $\xi_{1,\pm}$, считаются положительными при $x \rightarrow +\infty$. Чтобы выяснить, какое из решений соответствует правым (левым) движущимся носителям, нам понадобится квазиклассические токи:

$$j_{\pm} \equiv \psi_{\pm}^{\dagger} \sigma_y \psi_{\pm} = \frac{2q_{\pm}}{p} (\varepsilon - \mu). \quad (13)$$

При $x \rightarrow \pm\infty$ профильная функция $\varphi(x) \rightarrow 0$. Поэтому

$$j_{\pm} \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \pm 2(\varepsilon - \mu). \quad (14)$$

3.4. Исследование точек поворота. Теперь нам нужно найти те точки, в которых квазиклассичность решения нарушается. Обычно это точки ветвления квазиклассического момента $q_{\pm}$ (11). Эти точки на самом деле являются возможными особыми точками исходного дифференциального уравнения [22].

Точки ветвления p . Они одновременно являются и точками ветвления $q_{\pm}$:

$$\varphi(z_{\pm}) \equiv \varphi_{\pm} = \pm i \sqrt{1 - \frac{\mu^2}{\varepsilon^2}} \quad (15)$$

$$\varphi(z) = \varphi_{\pm} + (z - z_{\pm})/a + \dots \quad (16)$$

и квазиклассические импульсы, соответствующие различным линейным независимым решениям, совпадают. Мы предполагаем, что точки ветвления имеют простейшую структуру, т.е. являются корнями первого порядка $p^2(z)$. Соответствующая точка ветвления всегда находится вне действительной оси ввиду условия $\varepsilon > \mu$ (см. выражение (8)).

Разлагая потенциал $\varphi(z)$ в окрестности точек $z_{\pm}$, (уравнение (16)), мы сразу приходим к квазиклассическому условию (8) (после простой, но громоздкой алгебры, см. раздел А.2 в дополнительных материалах) в виде $\varepsilon \hbar^2 v_F^2 / [(\varepsilon^2 - \mu^2)^{3/2} |a| |z - z_{\pm}|] \ll 1$, которое нарушается в точках $z \rightarrow z_{\pm}$. Поэтому точки $z_{\pm}$ должны быть включены в реализацию метода П-Х.

Здесь мы замечаем, что параметр a в разложении (16) в принципе является комплексным. Однако его модуль $|a|$ соответствует характерному масштабу потенциала $\varphi(x)$.

Нули $q_{\pm}$. Эти точки, если они существуют, являются наиболее естественными кандидатами, в окрестности которых квазиклассический подход не работает. Очевидно, им соответствуют сингулярности профильной функции $\varphi(z)$. Мы предполагаем самый простой, но наиболее распространенный тип особенности – простой полюс:

$$\varphi(z) = \frac{ia}{z - z_p} + \dots \quad (17)$$

Здесь, как и раньше, $|a|$ соответствует характерной длине потенциала. Мнимая единица i введена для удобства. Точно так же, как было получено условие для точки ветвления p , мы получаем и квазиклассическое условие в окрестности точки поворота z_p , $q_{\pm}(z_p) = 0$: $\hbar v_F a \vee e / [(\varepsilon^2 - \mu^2) |z - z_p|^2] \ll 1$. Как и ожидалось, это условие также нарушается при $z \rightarrow z_0$. Поэтому z_p также следует включить в процедуру П-Х.

Об аналитической структуре $\varphi(z)$. Здесь следует вспомнить следующий факт из комплексного

анализа. Если профиль деформации $\varphi(z)$ не является постоянной функцией, то функция обязана иметь особенности в расширенной комплексной плоскости. Поэтому функция $\varphi(z)$ распадается на два общих класса: функция, имеющая особенности в конечных точках комплексной плоскости (типичным примером могут служить лоренцевы потенциалы), и функция, не имеющая особенностей в конечных точках комплексной плоскости (например, потенциалы гауссова типа). В последнем случае уместно следующее замечание. Поскольку $\varphi(x) \rightarrow 0$, $x \rightarrow \pm\infty$, последний класс соответствует ситуации, когда $\varphi(z)$ имеет существенную особенность в точке $z \rightarrow \infty$. Типичным примером может быть $\varphi(z) = P_n(z/a)e^{-z^2/a^2}$, где $P_n(z/a)$ – многочлен порядка из n . Наш анализ задачи, таким образом, разделен на два случая:

(i) Случай потенциала, регулярного в любой конечной точке.

(ii) Случай потенциала, имеющего особенности в конечных точках, когда тип особенностей ограничен простыми полюсами.

3.5. Регулярный потенциал. Этот случай соответствует классической трактовке П-Х, адаптированной к более сложному уравнению Дирака.

Преобразование уравнения Шредингера. Чтобы проследить аналогию между уравнением Дирака (уравнение (6)) и уравнением Шредингера, мы избавимся от первой производной в (6) с помощью стандартной замены [22]. Уравнение преобразуется следующим образом:

$$\psi''(x) + \eta(x)\psi'(x) + \kappa(x)\psi(x) = 0 \Rightarrow \theta''(x) + \pi^2(x)\theta(x) = 0 \quad (\text{Schrödinger equation}) \quad (18)$$

$$\theta(x) = e^{\frac{1}{2} \int^x \eta(t) dt} \psi(x), \quad (19)$$

$$\pi^2(x) = \kappa(x) - \frac{1}{2}\eta'(x) - \frac{1}{4}\eta^2(x). \quad (20)$$

Выражение для $\pi^2(x)$ довольно громоздкое. Однако поучительно записать $\eta(x)$ и $\pi^2(x)$, отбрасывая все производные потенциального поля $\varphi(x)$ (нулевое квазиклассическое приближение), а также квазиклассическое решение. Таким образом, связь с исходными квазиклассическими отношениями (10), (11) становится прозрачной:

$$\eta(x) = \frac{2i}{\hbar} \frac{\mu\varphi(x)}{\varphi^2(x) + 1}, \quad \pi^2(x) = \frac{\varepsilon^2(\varphi^2 + 1) - \mu^2}{(\varphi^2 + 1)^2} \quad (21)$$

$$\theta_{\pm}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi(x)}} \exp\left(\pm i \int_{x_0}^x \pi(t) dt\right). \quad (22)$$

В последнем уравнении точку x_0 нужно выбрать на действительной оси. Таким образом, обе функции $\theta_{\pm}$ имеют одинаковый модуль. В остальном x_0

совершенно произволен и выбирается из соображений удобства. Читатель, желающий отследить детали, может обратиться к разделу А.3 дополнительных материалов, где мы показываем, как (21)–(22) точно воспроизводят полные квазиклассические выражения (10)–(12), следующие из уравнения Дирака.

Точное решение вблизи точки поворота p . Изложение теперь повторяет замечательную работу [15]. Тем не менее мы хотели бы представить здесь некоторые подробности, чтобы читатель понял внутреннюю механику метода и мог следить за следующими разделами, которые более сложны.

Настало время реализовать шаг (ii) метода П-Х. Для определенности (и для того, чтобы сделать обозначения более краткими) нам нужно сделать выбор, в пользу точки, дающей доминирующий вклад в коэффициент отражения. Как обычно (и это будет видно ниже), это точка, расположенная ближе всего к действительной оси. Предположим, что это точка z_+ . В ситуации с модельными потенциалами несколько точек ветвления могут быть равноудалены от вещественной оси (например, $\varphi(z) = [\cosh(z/a)]^{-1}$). В этой ситуации все точки вносят одинаковый вклад в амплитуду отражения. Хотя эти случаи привлекательны с эстетической точки зрения и приводят к красивым ответам, содержащим квантовые осцилляции, они нереалистичны и не будут здесь обсуждаться.

С помощью (16) раскладываем квазиклассический импульс вблизи точки ветвления:

$$\pi^2(\zeta) = \frac{1}{\hbar^2} \frac{2i\zeta}{a} \frac{\varepsilon^5 \sqrt{\varepsilon^2 - \mu^2}}{\mu^4} + \dots, \quad \zeta = z - z_+, \quad (23)$$

так что уравнение (18) сокращается вблизи точки ветвления z_+ к классическому уравнению Эйри:

$$\theta''(s) + s\theta(s) = 0, \quad s = \gamma^{1/3}\zeta, \quad \gamma = \frac{2i\varepsilon^5}{a\hbar^2\mu^4} \sqrt{\varepsilon^2 - \mu^2}. \quad (24)$$

Подробности и некоторые тонкости вывода (24) см. в разделе А.4 дополнительных материалов. Асимптотика функции Эйри при больших значениях аргумента хорошо известна и должна быть сопоставлена с квазиклассическим разложением. Соответствующий анализ представлен в разделе В дополнительных материалов. Квазиклассические волновые функции (22) в окрестности $z_{\pm}$ на антистоксовой линии $n = 0$ (идущей вправо и соответствующей уходящей волне) принимают следующий вид:

$$\theta_{\pm}^{\text{app}}(s) = \frac{1}{s^{1/4}\gamma^{1/6}} \exp\left(\pm \frac{2i}{3}s^{3/2}\right), \quad s \gg 1. \quad (25)$$

Точное решение уравнения Эйри (24), имеющего асимптотику (25), имеет следующее интегральное представление:

$$\theta(s) = \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{\pi}\gamma^{1/6}} \int_C e^{st+t^3/3} dt, \quad (26)$$

где контур C представлен на рис. 3а. Чтобы сделать наше изложение самодостаточным, мы выводим интегральное представление (26) в разделе В дополнительных материалов. Контур расположен таким образом, что в асимптотику вносит вклад только седло $t_1 = i\sqrt{s}$. Константа перед интегралом (26) выбрана

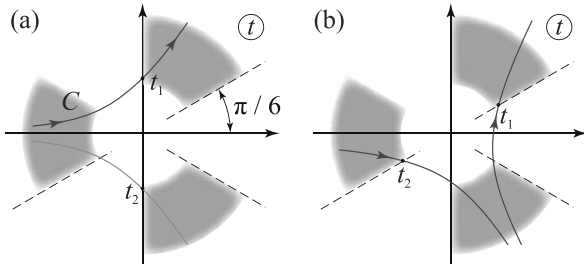


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – Размещение контура C , определяющего решение уравнения 26 для $\arg s = 0$. Асимптотические серые области – это области, в которых контур должен начинаться и оканчиваться (для сходимости интеграла). t_1, t_2 – седла подынтегральной функции. Контур проведен вдоль глобальной точной кривой наискорейшего спуска, проходящей через седло t_1 , оранжевая линия – второй путь наискорейшего спуска, проходящий через седло t_2 . (б) – Траектории наискорейшего спуска и седла для $\arg s = -2\pi/3$ (левая антистоксовая линия на рис. S1)

таким образом, чтобы асимптотика (26) при $s \rightarrow \infty$ в точности совпадала с квазиклассическим выражением (25) для $\theta_{\text{app}}^+(s)$. При переходе от правой антистоксовой линии к другой (идущей влево под углом $-2\pi/3$) асимптотика решения (26) преобразуется как:

$$\theta_<(s) = \frac{1}{\gamma^{1/6}} \left(\frac{\exp \left[\frac{2i}{3} s^{3/2} \right]}{s^{1/4}} - i \frac{\exp \left[-\frac{2i}{3} s^{3/2} \right]}{s^{1/4}} \right) \quad (27)$$

из-за того, что контур интегрирования деформирован согласно рис. 3б и оба седла подынтегрального выражения в (26) дают вклад в интеграл.

Сшивка точного и квазиклассического решения. Нам нужно убедиться, что область применимости квазиклассического разложения и точного решения имеют ненулевое пересечение. Справедливость квазиклассического разложения (25) равна $s \gg 1 \Rightarrow$

$$|z - z_+| \gg (a\hbar^2/\varepsilon^2)^{1/3}. \quad (28)$$

С другой стороны, условие справедливости тейлоровского разложения потенциала: $|z - z_+| \ll a$. Условием сосуществования двух последних условий является малость параметра $\varepsilon a/\hbar$, который и является главным параметром квазиклассического разложения задачи (уравнение (8)).

Мы видим, что решение слева от барьера расщепляется на две волны и идеально совпадает с квазиклассическими выражениями (25) в той же области. Таким образом, мы заменяем обе волны в (27) полуклассическими волнами (22):

$$\theta_<(z) = \theta_+(z) \Big|_{z_+} - i \theta_-(z) \Big|_{z_+}. \quad (29)$$

В последнем уравнении мы вернулись от s обратно к z . Предполагается, что в интеграле, определяющем показатель степени в функциях $\theta_{\pm}$ в (22), мы изменили нижний предел интегрирования с x_0 на z_+ .

Наконец, сделаем аналитическое продолжение волновой функции (29) на вещественной оси $z \rightarrow x$. Структура уравнения становится особенно прозрачной с помощью соотношения:

$$\theta_{\pm}(x) \Big|_{z_+} = e^{\pm i \int_{z_+}^{x_0} \pi(z) dz} \theta_{\pm}(x), \quad (30)$$

где углы $\theta_{\pm}$ определены в уравнении (22). Таким образом, мы получаем коэффициент отражения:

$$R = e^{-\frac{4}{\hbar v_F} \text{Im} \int_{x_0}^{z_+} \frac{\sqrt{\varepsilon^2(\varphi^2+1)-\mu^2}}{\varphi^2+1} dz}, \quad (31)$$

где для наглядности мы восстановили скорость Ферми v_F . Коэффициент отражения (31) – первый основной результат нашей статьи. Он имеет типичный квазиклассический вид. Показатель экспоненциальной функции можно оценить как $\# \varepsilon a/\hbar \gg 1$, что делает коэффициент отражения экспоненциально малым.

Несмотря на свою простоту, результат (31) имеет некоторую особенность. А именно, далеко не очевидно, как осуществить переход от произвольного $\mu < \varepsilon$ к $\mu \rightarrow 0$ (исчезающему внешнему магнитному полю) в формуле (31). Дело в том, что при обращении в нуль μ TR-симметрия задачи восстанавливается, и коэффициент отражения должен обращаться точно в нуль. Модификация результата (31), отражающая эту фундаментальную симметрию рассматриваемой задачи, являет собой наиболее нетривиальную часть нашего анализа. Она приводится в разделе после изучения борновского приближения.

3.6. Потенциал с полюсом.

Точное решение в окрестности точки поворота. Квазиклассическая картина антистоксовых ли-

ний представлена в разделе С.2 дополнительных материалов. Подробности аналитического продолжения квазиклассических волновых функций (12) в окрестности простого полюса z_p вдоль антистоксовых линий (см. уравнение (S.40)) приведены в разделе D дополнительных материалов. Получаем следующую асимптотику:

$$\begin{aligned}\psi_{1+, \geq}(\zeta) &= \frac{\varepsilon + \mu}{\varepsilon} \sqrt{\frac{\varepsilon - \mu}{2}} \left(\frac{\zeta}{a}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\varepsilon + \mu}{2a} \zeta^2 + \frac{3\pi i}{4}} \\ \psi_{1-, \geq}(\zeta) &= \sqrt{2(\varepsilon - \mu)} \left(\frac{\zeta}{a}\right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{\varepsilon - \mu}{2a} \zeta^2 + \frac{i\pi}{4}},\end{aligned}\quad (32)$$

где, как и ранее, символ $>$ ($<$) соответствует квазиклассическому решению на правой (левой) антистоксовой линии в окрестности точки поворота z_p . Соотношения (32) записаны в квазиклассическом пределе $\zeta \gg \sqrt{|a|/\varepsilon}$.

Теперь нам нужно получить точное решение уравнения Дирака (6) в окрестности точки поворота z_p . Однако разложение уравнения (4) в окрестности z_p довольно громоздко, и мы отсылаем читателя к разделу С.1 дополнительных материалов. К счастью, грамотная замена $\psi_1(\zeta) = \exp(\zeta^2/2a[\varepsilon - \mu])\sqrt{\zeta}\psi(\zeta)$ приводит к исчезновению (!) слагаемого без производной в (4), что приводит к гораздо более простому дифференциальному уравнению:

$$a\psi''[2\zeta^2(\mu + \varepsilon) - a] + \psi'[4\zeta^3\varepsilon(\mu + \varepsilon) - 2a\zeta(2\mu + 3\varepsilon)] = 0, \quad (33)$$

тривиально интегрируемому в квадратурах:

$$\begin{aligned}\psi_1(\zeta) &= \sqrt{\frac{\zeta}{a}} \left(c_1 - c_2 \frac{\sqrt{\pi}\mu}{2\varepsilon^{3/2}\sqrt{a}} \operatorname{erf}\left[\sqrt{\varepsilon a} \frac{\zeta}{a}\right] \right) e^{\frac{\varepsilon - \mu}{2a} \zeta^2} \\ &\quad + c_2 \frac{\varepsilon + \mu}{\varepsilon} \left(\frac{\zeta}{a}\right)^{3/2} e^{-\frac{\varepsilon + \mu}{2a} \zeta^2},\end{aligned}\quad (34)$$

где erf – функция ошибок, $\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-t^2} dt$. Теперь у нас есть все необходимое для сопоставления точного решения (34) с квазиклассическими волновыми функциями (32).

Сшивка квазиклассического и точного решений. Для получения коэффициента отражения потребуем, чтобы на правой антистоксовой линии присутствовала только прошедшая квазиклассическая волна, т.е. асимптотика решения (34) совпадала с функцией $\psi_{1+, >}$ в (32). Это немедленно дает условие (асимптотику функции erf см. в разделе С.3) дополнительных материалов):

$$c_1 = \frac{\sqrt{\pi}\mu}{2\varepsilon^{3/2}\sqrt{a}} c_2, \quad c_2 = \sqrt{\frac{\varepsilon - \mu}{2}} e^{3\pi i/4}. \quad (35)$$

Выражение для c_2 следует из требования точного совпадения с $\psi_{1+, >}$ в (32). Таким образом, мы имеем решение на левой антистоксовой линии:

$$\psi_1(\zeta) \Big|_{\text{left}} = \psi_{1+, <}(\zeta) + \frac{i\sqrt{\pi}\mu}{2\varepsilon^{3/2}\sqrt{a}} \psi_{1-, <}(\zeta). \quad (36)$$

Заменяя квазиклассические выражения $\psi_{1\pm, <}$ на общие выражения (12), мы можем осуществить аналитическое продолжение с антистоксовой линии к вещественной оси x . Заметив, что $\xi_{1, +} = \xi_{1, -}$ при $x \rightarrow -\infty$ в (12), мы получаем (в полной аналогии с предыдущим выводом) коэффициент отражения

$$R = \frac{\pi \hbar v_F}{|a|} \frac{\mu^2}{4\varepsilon^3} e^{-\frac{4}{\hbar v_F} \operatorname{Im} \int_{x_0}^{z_p} \frac{\sqrt{\varepsilon^2 - \mu^2 + \varepsilon^2 \varphi^2(z)}}{1 + \varphi^2(z)} dz}, \quad (37)$$

где x_0 , как и раньше, – произвольная точка вещественной оси. Здесь мы восстановили $\hbar$ и скорость Ферми. Результат (37) дополняет результат (31), полученный для регулярной функции деформации $\varphi(z)$. Мы видим, что эти два соотношения имеют одну и ту же квазиклассическую экспоненту, как и следовало ожидать от квазиклассического анализа. Разница между разными классами потенциалов выражена в предэкспоненциальном множителе. И здесь проявляется первая интересная особенность задачи.

Сравнивая коэффициенты отражения (31) и (37), мы видим, что в отличие от первого, второй явно соблюдает TR-симметрию ТИ. А именно, коэффициент отражения обращается в нуль в случае исчезновения магнитного поля $\mu \rightarrow 0$, когда восстанавливается TR-симметрия квазичастичных возбуждений ТИ.

4. Борновское приближение. Целью данной части статьи является разрешение парадокса, описанного в предыдущем разделе. А именно, речь идет о неисчезающем при нулевом значении магнитного поля коэффициенте отражения. Для начала попробуем проанализировать задачу рассеяния в пределе слабого магнитного поля $\mu \ll \varepsilon$, ограничившись первым борновским приближением по силе поля.

TR-симметрия задачи дает нам приятный сюрприз. Удивительно, но нам удалось найти точное решение уравнения Дирака (4) в отсутствие магнитного поля $\mu = 0$ при любом потенциале деформации. Естественно, в силу TR-симметрии точное решение является безотражательным. Теперь мы увидим, как даже малейшее магнитное поле влияет на аналитическую структуру решения и приводит к ненулевому отражению в задаче.

Точное решение. Перепишем исходный гамильтониан в отсутствие магнитного поля:

$$H = v_F \sigma_y \hat{p} + \frac{\sigma_z}{2} (\varphi \hat{p} + \hat{p} \varphi). \quad (38)$$

Оказывается, можно придумать унитарное преобразование

$$\psi(x) = \exp[i\theta(x)\sigma_x]\tilde{\psi}(x), \quad \tan 2\theta(x) = \varphi^{-1}(x), \quad (39)$$

переводящее гамильтониан (38) в гораздо более простую форму (см. раздел Е.1 дополнительных материалов):

$$\tilde{H} = \frac{1}{2}(v\hat{p} + \hat{p}v)\sigma_z, \quad (40)$$

где $v(x) = v_F\sqrt{\varphi^2(x) + 1}$. Гамильтониан (40) имеет следующие точные собственные функции (см. вывод в Е.2 дополнительных материалов):

$$\psi_{\varepsilon}(x) = \frac{e^{i\varepsilon\tau(x)}}{\sqrt{v(x)}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_{\varepsilon}(x) = \frac{e^{-i\varepsilon\tau(x)}}{\sqrt{v(x)}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (41)$$

$$\tau(x) = \int_0^x \frac{dx'}{v(x')} \equiv \int_0^x \frac{dx'}{\sqrt{\varphi^2(x') + 1}}. \quad (42)$$

И ясно видно, что точное решение, отвечающее движущейся направо волне (41), остается таковым на всей вещественной оси, и мы имеем безотражательную ситуацию, ожидаемую из TR-симметрии системы.

Теория возмущений по μ . Для построения теории возмущений нам понадобится функция Грина для преобразованного гамильтониана (40) (см. раздел Е.3 дополнительных материалов):

$$G(\epsilon; x, x') = -\frac{i}{2}(1 + \text{sign}[\tau(x) - \tau(x')]\sigma_z) \frac{e^{i\epsilon|\tau(x) - \tau(x')|}}{\sqrt{v(x)v(x')}}, \quad (43)$$

где $\text{sign}(x)$ – функция знака. Затем мы рассматриваем возмущение, создаваемое магнитным полем; в исходном базисе это $V = \mu\sigma_z$. При унитарном преобразовании $\tilde{U}$ получаем:

$$\tilde{V}(x) = \frac{\mu}{\varphi^2(x) + 1} [\varphi(x)\sigma_z - \sigma_y]. \quad (44)$$

Тогда отраженная волна определяется теорией возмущений следующим образом:

$$\psi_{\text{ref}}(x) = - \int_{-\infty}^{\infty} G(\epsilon; x, x') \tilde{V}(x') \psi_{\varepsilon}(x') dx'. \quad (45)$$

Подставляя преобразованный потенциал рассеяния (44) и функцию Грина (43) в (45), мы получаем (после некоторой простой алгебры) отраженную волну в первом порядке теории возмущений:

$$\psi_{\text{ref}} = r \psi_{\varepsilon}(x), \quad r = \mu \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{2i\varepsilon\tau(x')}}{1 + \varphi^2(x')} dx', \quad (46)$$

где r – итоговая амплитуда отражения в борновском приближении. Внимательный читатель сразу заметит, что интеграл, определяющий r , расходится. Как показано в разделе Е.2 дополнительных материалов, этот интеграл следует понимать как взятый по наклонным направлениям $-\infty \rightarrow \infty e^{i\pi-\delta}$ и $\infty \rightarrow \infty e^{i\delta}$, где δ – сколь угодно малый положительный угол.

5. Сопоставление борновского и квазиклассического приближений. Раздел 4 был посвящен выводу амплитуды отражения в первом борновском приближении. Однако выражение для амплитуды борновского отражения (46) должно оставаться справедливым даже в квазиклассическом пределе, если выполняется квазиклассическое условие плавности (8).

Как легко видеть, условие (8) подразумевает расчет борновской амплитуды (46) методом наискорейшего спуска. Поэтому мы ожидаем, что отражение, даваемое интегрированием методом наискорейшего спуска борновского выражения, и квазиклассические ответы должны совпадать. Следуя общей структуре нашего квазиклассического изложения, нам необходимо рассмотреть два существенно различных случая: случай потенциала регулярного профиля $\varphi(z)$ (раздел 3.5) и потенциала с полюсом (раздел 3.6).

5.1. Регулярный потенциал.

Квазиклассический предел борновского приближения. Как и в разделе 3.5, функция $\varphi(z)$ считается целой функцией в комплексной плоскости. Следовательно, функция $\tau(z)$ (уравнение (42)) не имеет особенностей, кроме точек ветвления типа квадратного корня, где функция $\varphi^2 + 1$ имеет корни (которые предполагаются первого порядка в общей ситуации).

Метод наискорейшего спуска предполагает деформацию контура в интеграле (46) вдоль путей наискорейшего спуска вещественной части показательной функции: $\text{Re } i\tau(z)$. Поэтому нам необходимо знать расположение стационарных кривых функции $\tau(z)$, т.е. линий уровня $\text{Re}[\tau(z)]$. Подробный анализ немного кропотлив, но открывает удивительную картину (раздел F.1 дополнительных материалов). Оказывается, полученный контур наискорейшего спуска дважды (!) обходит каждую из точек ветвления $\tau(z)$ по бесконечно малым окружностям. Контур наискорейшего спуска в итоге располагается на бесконечном количестве римановых листов $\tau(z)$. В результате главный вклад в интеграл дает сумма вычетов подынтегрального выражения в (46), умноженная на $4\pi i$ (двойной обход).

$$r \xrightarrow{\varepsilon a \rightarrow \infty} 4\pi i \mu \sum_{\text{all branch points}} \text{res}_{z_n} \frac{e^{2i\varepsilon\tau(z)}}{\varphi^2(z) + 1} \approx 2\pi a \mu e^{2i\varepsilon\tau(z_0)}, \quad (47)$$

где a – есть ни что иное, как характерная длина потенциала, и определяется из разложения Тейлора

$$\varphi(z) = i + (z - z_0)/a. \quad (48)$$

Все подробности размещения контура приведены в разделе F.2 дополнительных материалов. В результате коэффициент отражения в борновском приближении в квазиклассическом пределе имеет следующий простой вид:

$$R \equiv |r|^2 = \frac{4\pi^2 \mu^2 |a|^2}{v_F^2 \hbar^2} e^{-\frac{4\varepsilon}{\hbar v_F} \text{Im} \int_0^{z_0} \frac{dz}{\sqrt{\varphi^2(z)+1}}}. \quad (49)$$

Борновское приближение из квазиклассического анализа. Сравнивая формулу для коэффициента отражения, представленную анализом П-Х (31), и ответ (49), заданный квазиклассическим пределом теории возмущений, сразу видим, что квазиклассический результат (31) не может соответствовать пертурбативному выражению (49). Это хорошо видно уже из того факта, что, в отличие от (49), выражение (31) имеет ненулевой предел в точке $\mu \rightarrow 0$.

Проблема в том, что квазиклассический анализ, предпринятый в разделе 3.5, перестает работать, когда $\mu \rightarrow 0$. Дело в том, что при $\mu \ll \varepsilon$ полюс квазиклассического импульса (11) при $\varphi = \pm i$ приближается к точкам ветвления p : $\varphi_{\pm}$ (см. уравнение (15)).

Это означает, что точное решение вблизи точки поворота (26) не может быть продолжено в асимптотическую область (28), поскольку разложение Тейлора функции $\varphi(z)$ вблизи точки поворота перестает быть справедливым из-за наличия полюса z_0 : $\varphi = i$. Необходимую оценку легко сделать. При $\mu \ll \varepsilon$ расстояние $z_0 - z_{\pm} \ll a$, а $|z_0 - z_{\pm}| \sim \mu^2/\varepsilon^2 a$. Таким образом, асимптотическое разложение (26) становится недействительным, если расстояние $s \sim 1$ в (26) (эквивалентно, $|z - z_{\pm}| \sim a^{1/3}/v e^{-2/3}$ становится одного порядка с $|z_0 - z_{\pm}|$). Это влечет за собой:

$$\frac{\mu}{\varepsilon} \sim \frac{1}{(a\varepsilon)^{1/3}}. \quad (50)$$

Следовательно, при $\mu \lesssim \varepsilon^{2/3}/a^{1/3}$ обычный метод П-Х не работает. Возможная модификация метода на случай сливающихся точки ветвления и полюса, также изложена (для уравнения Шредингера) в [15]. Во-первых, мы обращаем внимание читателя на структуру пертурбативного результата (49). Она показывает, что основной вклад в амплитуду рассеяния дает квазиклассическое действие $S = \int_{x_0}^{z_0} \pi(x) dx$ (см. выражение для π в уравнении (8) при $\mu = 0$), указывая на то, что надбарьерное рассеяние происходит в точке ветвления $\varphi = i$ (т.е. z_0). На самом деле, как мы

увидим, линии анти-Стокса по-прежнему выходят из точек ветвления $z_{\pm}$, но сильно искажаются наличием полюса z_0 .

Антистоксовы линии в точке ветвления p в пределе $\mu \ll \varepsilon$. Реализуем шаг (ii) метода П-Х. Как и прежде, выбираем точку z_+ . Однако на этот раз следует использовать разложение Лорана квазиклассического импульса (21) вблизи полюса z_0 , а не разложение Тейлора вблизи точки ветвления z_+ . Подставив расширение (48), получим:

$$\pi(\zeta) = \frac{a\varepsilon}{2i\zeta} \sqrt{\frac{2i\zeta}{a} - \frac{\mu^2}{\varepsilon^2}} + \dots \rightarrow e^{-i\pi/4} \varepsilon \sqrt{\frac{a}{2\zeta}}. \quad (51)$$

Последний переход в (51) осуществляется в предположении $|\zeta/a| \gg (\mu^2/\varepsilon^2)$. Тогда квазиклассическое действие и квазиклассическое условие будут выглядеть так:

$$\int_0^{\zeta} \pi(t) dt = e^{-i\pi/4} \varepsilon \sqrt{2a\zeta}, \quad |\zeta| \gg \frac{1}{|a|\varepsilon^2}, \quad (52)$$

и условие для направлений антистоксовых линий теперь выглядит так:

$$\text{Re} i \int_0^{\zeta} \pi(t) dt = 0 \Rightarrow \arg(a\zeta) = \frac{\pi}{2} + 2\pi n, \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (53)$$

Уравнение (53) вместе с (S.17) дает весьма своеобразную картину антистоксовых кривых. В непосредственной близости от точки ветвления z_+ (где справедливо разложение Тейлора квазиклассического импульса (23)) антистоксовые линии образуют триплет линий, исходящих под углами $2\pi/3$ по отношению к друг другу. С другой стороны, уравнение (53) говорит нам, что они сливаются в дублет, проходя по берегам разреза, определяющего однозначную ветвь функции $\pi(\zeta)$. Наконец, мы ожидаем, что антистоксовые линии образуют дублет, состоящий из двух горизонтальных линий, когда они достаточно далеки от z_0 , $z_{\pm}$. Эти общие соображения проиллюстрированы на рис. 4а для случая, когда параметр разложения a в (16) и в (48) положен для определенности действительным.

В дальнейшем и в самом деле удобно считать, что параметр a в разложении (48) вещественный. Для общей ситуации ненулевого $\arg a$ единственной разницей будет наклон всех графиков на необходимый угол.

Описанная общая картина формы антистоксовых кривых выглядит довольно необычно (и в какой-то

степени в нее даже трудно поверить). Для иллюстрации ее правильности, мы приведем рисунок точных антистоксовых линий (в виде линии уровня рельефа $\text{Re} i \int_{z_+}^z \pi(t) dt$ на рис. 4b, c) для конкретной потенциальной функции $\varphi(z) = z \exp(-z^2/2)$.

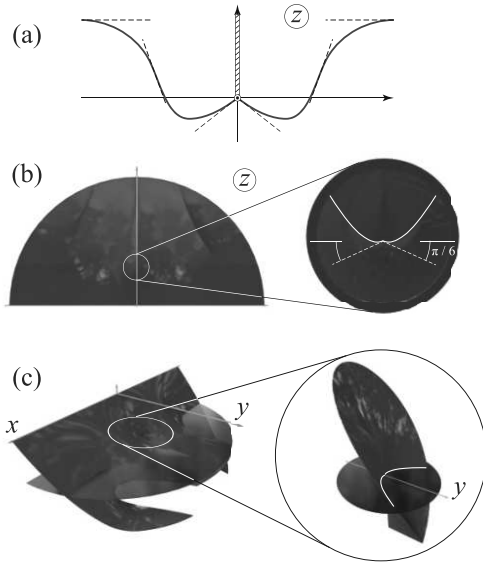


Рис. 4. (Цетной онлайн) (a) – Структура антистоксовых линий из общих соображений. (b), (c) – Антистоксовые линии изображаются как линии уровня функции $i \text{Im} \int_0^\zeta \pi(t) dt$ для потенциального профиля $\varphi(z) = ze^{-z^2/2}$ и для $\mu/\varepsilon = 0.15$

Квазиклассические решения (12) теперь легко получить, взяв начальную точку $z = z_0 - ai\mu^2/(2\varepsilon^2)$ (см. раздел G дополнительных материалов).

$$\psi_{+, \geq} = \sqrt{\varepsilon} \left(\frac{\mu}{\varepsilon} \right)^{ia\mu} \left(\frac{a}{2y} \right)^{\frac{ia\mu}{2} + \frac{1}{2}} e^{i\varepsilon\sqrt{2ay} \mp i\pi\frac{\pi}{4} \pm \frac{\pi\mu a}{2}}, \quad (54)$$

$$\psi_{+, <} = \sqrt{\varepsilon} \left(\frac{\mu}{\varepsilon} \right)^{ia\mu} \left(\frac{a}{2y} \right)^{\frac{ia\mu}{2} + \frac{1}{2}} e^{-i\varepsilon\sqrt{2ay} + \frac{3i\pi}{4} - \frac{\pi\mu a}{2}}. \quad (55)$$

Здесь обозначение индекса $\pm$ соответствует (12).

Точное решение вблизи точки ветвления p at $\mu \ll \varepsilon$. Разлагая уравнение Дирака (6) вблизи z_0 , получаем:

$$2i\zeta\psi_1'' + (3i - 2a\mu)\psi_1' + \varepsilon^2 a\psi_1 = 0. \quad (56)$$

Здесь предполагается, что параметр μa удовлетворяет условию $0 \leq \mu a \lesssim 1$. Уравнение (56) представляет собой уравнение типа Бесселя. В принципе, его аналитические свойства и структуру асимптотики мож-

но взять из справочника. Однако для изучения аналитического продолжения решения в нашем случае, чрезвычайно поучительно и удобно представить точное решение уравнения (56) методом Лапласа (см. дополнительные материалы)

$$\psi_1(\zeta) = -i\varepsilon \sqrt{\frac{\varepsilon a}{2\pi}} \left(\frac{\mu}{\varepsilon} \right)^{ia\mu} e^{\frac{\pi a \mu}{2}} \int_C e^{\zeta s + \frac{\varepsilon a i}{2s}} s^{ia\mu - \frac{1}{2}} ds. \quad (57)$$

Здесь константа перед интегралом выбрана таким образом, чтобы асимптотика $\psi(iy)$ в (57) на правой антистоксовой линии соответствовала соответствующему квазиклассическому решению (54).

Контур, дающий правильную асимптотику на правой антистоксовой линии $\zeta = iy$, представлен на рис. 5а. Размещение контура продиктовано возможностью провести линию наискорейшего спуска показательной функции в (57):

$$f(s, \zeta) = \zeta s + \frac{ai}{2s} \quad (58)$$

через седло $s_1 = \sqrt{a/2y}$ ($\zeta = iy$) функции $f(s, \zeta)$. Таким образом, точное решение (57) дает правильную основную экспоненту (см. квазиклассическое выражение (54)).

После поворота комплексного числа ζ справа налево по часовой стрелке, контур C , задающий точное решение (57), должен повернуть на тот же угол против часовой стрелки, чтобы гарантировать сходимость интеграла (см. рис. 5b). При этом начальное направление контура ($s = 0$) должно быть по-прежнему вниз (опять же, для сходимости интеграла). В результате контур C закручивается в спираль (см. рис. 5c) после того, как ζ достигает левой антистоксовой линии. Чтобы процедура вычисления асимптотики была безупречной, контур интегрирования C должен быть проведен по глобальным путям наискорейшего спуска $f(s, \zeta)$. Соответствующая деформация представлена на рис. 6а, б. Как мы видим, правое седло s_1 дает двойной вклад, а контур интегрирования C проходит через него на разных римановых листах подынтегрального выражения. Таким образом, вклад этого седла умножается на коэффициент $1 + e^{2\pi i(ia\mu - 1/2)} \equiv e^{-\pi\mu a} 2 \sinh \pi\mu$. В результате (простые подробности см. в разделе H дополнительных материалов), асимптотика (57) на левой антистоксовой линии может быть выражена через квазиклассические функции (54), (55) (в той же строке) следующим образом.

$$\psi(iy) \Big|_{\text{left}} = \psi_{+, <}(iy) - 2i \sinh \pi\mu a \psi_{-, <}(iy). \quad (59)$$

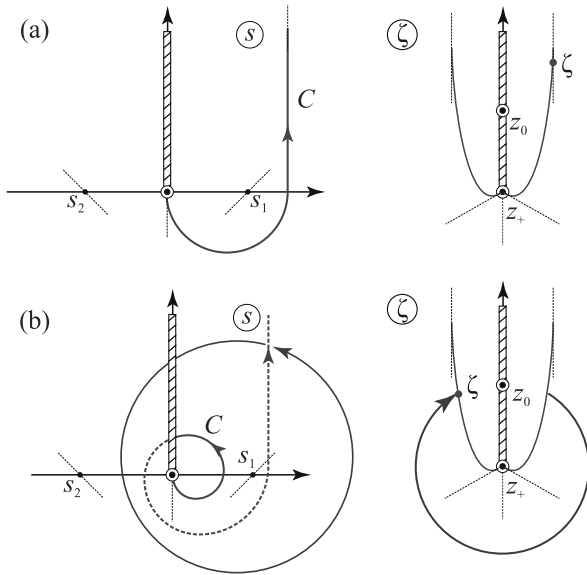


Рис. 5. (Цветной онлайн) (а) – Справа: антистоксовые линии вблизи точки z_+ . Точка ζ на правой антистоксовой линии такова, что волновая функция в этой точке представляет собой исходящую волну и должна соответствовать (54). Пунктирные линии – примерные направления антистоксовых линий. Слева: начальное размещение контура C для решения (57). s_1 и s_2 – седловые точки функции $f(s, \zeta)$ в (58). Пунктирные линии – линии наискорейшего спуска $f(s, \zeta)$. (б) – Справа: аргумент ζ находится на левой антистоксовой прямой (повернут на 2π). Слева: контур C деформирован в спираль

Уравнение (59) дает возможность сопоставить точное решение (57) в окрестности точки ветвления с квазиклассическими решениями во всей комплексной верхней полуплоскости, включая действительную ось.

Сшивку точного и квазиклассического решения. Продолжая шаг (v) метода П-Х, получаем при $x \rightarrow -\infty$:

$$\psi(x) = \xi_1 + e^{i \int_{z_+}^x q_+ dz} - 2i \sinh \pi \mu a \xi_1 - e^{i \int_{z_+}^x q_- dz}. \quad (60)$$

Наконец, восстановив постоянную Планка и скорость Ферми, для коэффициента отражения получим:

$$R = 4 \left| \sinh^2 \frac{\pi \mu a}{\hbar v_F} \right| e^{-\frac{4}{\hbar v_F} \text{Im} \int_{x_0}^{z_+} \frac{\sqrt{\varepsilon^2(\varphi^2+1) - \mu^2}}{\varphi^2+1} dz}. \quad (61)$$

Коэффициент отражения (61) представляет собой обобщение результата (31) на случай $\mu a \sim 1$. Результат (61) точно сшивается с результатом борновского приближения (49) в пределе $\mu a \rightarrow 0$. Уравнение (61) также разрешает парадокс не обращающегося в нуль коэффициента отражения (31) при $\mu \rightarrow 0$.

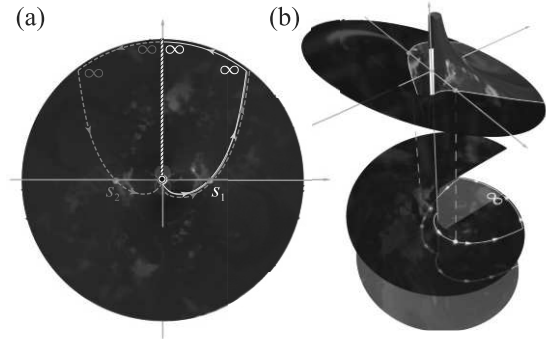


Рис. 6. (Цветной онлайн) (а) – Контур наискорейшего спуска, задающий асимптотику точного решения (57) на левой антистоксовой линии. Голубой цвет означает размещение контура на другом римановом листе многозначной функции $s^{ia\mu-1/2}$ из подынтегрального выражения (57). (б) – Верх: размещение контура на рельефе функции $\text{Ref}(s, \zeta)$. Низ: размещение контура на римановой поверхности функции $s^{ia\mu-1/2}$. Красный лист соответствует обычной ветке $s^{ia\mu-1/2} \equiv \exp((ia\mu - 1/2) \ln |s|)$ для $s > 0$ в то время как зеленый лист соответствует ветви $s^{ia\mu-1/2} \equiv \exp([ia\mu - 1/2][\ln |s| + 2\pi i])$ для $s > 0$

Результат (61) содержит поразительную особенность. Параметр a , определенный в уравнении (16), входящий в функцию $\sinh$ в предэкспоненциальном множителе (61), вообще говоря, может быть комплексным. Это означает, что гиперболическая функция может иметь гармонический вклад типа $\sin$: $|\sinh \pi \mu a|^2 = \sinh^2[\pi \mu \text{Re } a] \cos^2[\pi \mu \text{Im } a] + \cosh^2[\pi \mu \text{Re } a] \sin^2[\pi \mu \text{Im } a]$, а коэффициент отражения (61) может содержать квантовые осцилляции в зависимости от внешнего магнитного поля независимо от энергии падающей частицы. Осцилляции возможны ввиду того, что формула (61) справедлива для $0 \leq \mu a \lesssim 1$, как мы указываем после уравнения (56). Тогда мы ожидаем появления выраженных квантовых осцилляций ландауэровского кондактанса краевых состояний ввиду независимости предэкспоненциального множителя от энергии квазичастицы.

Для существования упомянутых колебаний профиль деформации должен быть слегка асимметричным (таким образом, мнимая часть параметра a существенно превышает действительную). Как показывает элементарное изучение функции $\sinh$, ее немонотонное поведение проявляется при $\text{Im } a / \text{Re } a \gtrsim 2.64$. Период колебаний определяется условием: $\Delta \mu \sim \hbar v_F / (\pi |a|)$. Амплитуда колебаний порядка самого коэффициента отражения $\Delta R \sim R$.

Коэффициент отражения (61) для модельного асимметричного потенциала представлен на рис. 7.

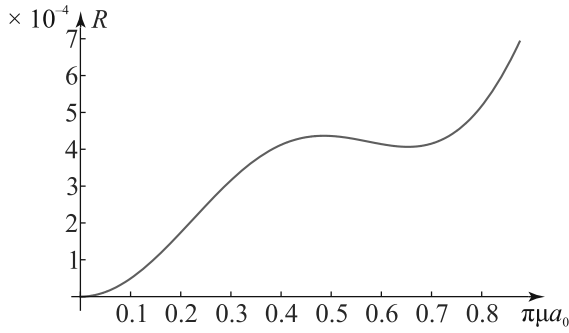


Рис. 7. (Цветной онлайн) Колебания коэффициента отражения (61), рассчитанные для модельного потенциала $\varphi(z) = (z - 8)e^{-z^2}$ в зависимости от параметра магнитного поля $\pi\mu a_0$, где параметр $a_0 \equiv |a|_{\mu=0}$ (см. (16))

5.2. Потенциал с полюсом. Теперь мы реализуем ту же программу для гораздо более простого случая потенциала с полюсом. Амплитуда отражения, полученная в (46), должна быть сопоставлена с амплитудой, полученной из квазиклассического приближения (37) в пределе $\varepsilon a / (\hbar v_F) \gg 1$. Как и раньше, это соответствует взятию интеграла, входящего в (46) методом перевала:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{2i\varepsilon\tau(x')}}{1 + \varphi^2(x')} dx' \approx e^{i\pi/4} \sqrt{\frac{\pi}{\varepsilon a}} \frac{e^{2i\varepsilon\tau(z_p)}}{2\varepsilon}, \quad (62)$$

где z_p : $\varphi(z_p) = \infty$ – седловая точка функции $\tau(z)$ (которая также является точкой поворота для квазиклассического импульса). Таким образом, мы получаем коэффициент отражения:

$$R = \frac{\pi\mu^2}{4|a|\varepsilon^3} e^{-4\varepsilon \operatorname{Im} \int_0^{z_0} \frac{dx}{\sqrt{1+\varphi^2(x)}}}. \quad (63)$$

Этот результат совпадает с квазиклассическим коэффициентом отражения (37) в пределе $\mu \ll \varepsilon$. Это совпадение дает дополнительное убедительное доказательство корректности квазиклассического результата (37).

Коэффициенты отражения (31) и (37), полученные в квазиклассическом приближении для двух широких классов деформаций общего типа, дополненные уточненным результатом (61), завершают наше исследование задачи рассеяния. Они являются основными результатами данной работы.

6. Обсуждение. Итак, мы аналитически исследовали рассеяние квазичастиц на краевых дефектах двумерного ТИ в однородном магнитном поле. Мы использовали два взаимодополняющих подхода: метод П-Х и теорию возмущений в магнитном поле. Мы получили коэффициенты отражения для двух наи-

более важных классов деформационных потенциалов и убедились, что они совпадают в общей области применимости обоих методов. Исследование выявило нетривиальную взаимосвязь ТР-симметрии и аналитических свойств амплитуды отражения.

Наши результаты позволяют провести прямую экспериментальную проверку. Результаты теории возмущений, очевидно, справедливы для достаточно малого внешнего магнитного поля. Квазиклассический параметр $\lambda/a = \hbar v_F / (\varepsilon a)$ легко оценить из обычных экспериментальных данных. Для двумерного ТИ, полученного в квантовой яме HgTe с затвором, параметр расщепления Рашбы $\alpha \sim 10$ эВÅ, [23], скорость Ферми $v_F \approx 2$ эВÅ, [24]. Мы видим, что параметр Рашбы α примерно того же порядка, что и скорость Ферми $\alpha \sim v_R$. Таким образом, для типичного эксперимента размер краевого дефекта 1 мкм намного превышает длину волны квазичастицы $\lambda \sim 100$ Å, [25], что и оправдывает использование квазиклассического приближения. Далее нам хотелось бы оценить магнитное поле, при котором могут наблюдаться квантовые осцилляции, предсказанные выражением для коэффициента отражения (61). g -фактор для винтовых краевых состояний в поперечном магнитном поле был измерен в [26]: $g \approx 50$. Следовательно, если снова принять типичный масштаб деформации ~ 1 мкм, необходимое магнитное поле составит $H \sim v_F \hbar / (g \mu_B a) \sim 0.07$ Тл.

Авторы выражают благодарность Федеральной программе академического лидерства “Приоритет 2030”.

Финансирование работы. Данная работа финансировалась за счет средств гранта национального исследовательского технологического университета “МИСиС” К2-2022-025, Фонда развития теоретической физики и математики “Базис” по гранту # 22-1-1-24-1, П. Д. Григорьев благодарит за поддержку государственное задание # FFWR-2024-0015.

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. I. Žutić, J. Fabian, and S. Das Sarma, Rev. Mod. Phys. **76**, 323 (2004).
2. C. Nayak, S. H. Simon, A. Stern, M. Freedman, and S. Das Sarma, Rev. Mod. Phys. **80**, 1083 (2008).
3. J. Moore, Nature Phys. **5**, 378 (2009).
4. M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, Science **318**, 766 (2007).
5. D. Hsieh, D. Qian, L. Wray, Y. Xia, Y. S. Hor, R. J. Cava, and M. Z. Hasan, Nature **452**, 970 (2008).

6. H. Zhang, C.-X. Liu, X.-L. Qi, X. Dai, Z. Fang, and S.-C. Zhang, *Nature Phys.* **5**, 438 (2009).
7. Z. D. Kvon, D. A. Kozlov, E. B. Olshanetsky, G. M. Gusev, N. N. Mikhailov, and S. A. Dvoretzky, *Phys.-Uspekhi* **63**, 629 (2020).
8. O. Deb, A. Soori, and D. Sen, *J. Phys. Condens. Matter* **26**, 315009 (2014).
9. T. M. Herath, P. Hewageegana, and V. Apalkov, *Phys. Rev. B* **87**, 075318 (2013).
10. N. I. Fedotov and S. V. Zaitsev-Zotov, *Phys. Rev. B* **95**, 155403 (2017).
11. C. L. Kane and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 226801 (2005).
12. J. Hinz, H. Buhmann, M. Schäfer, V. Hock, C. R. Becker, and L. W. Molenkamp, *Semicond. Sci. Technol.* **21**, 501 (2006).
13. H. Yang, X. Peng, W. Liu, X. Wei, G. Hao, C. He, J. Li, G. M. Stocks, and J. Zhong, *J. Phys. Condens. Matter* **26**, 395005 (2014).
14. M. V. Durnev and S. A. Tarasenko, *Phys. Rev. B* **93**, 075434 (2016).
15. V. Pokrovskii and I. Khalatnikov, *Soviet Phys. JETP* **13**, 1207 (1961).
16. X.-L. Qi and S.-C. Zhang, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1057 (2011).
17. Y. A. Bychkov and E. I. Rashba, *Journal of Physics C: Solid State Physics* **17**, 6039 (1984).
18. Y. Zhang, K. He, C.-Z. Chang, C.-L. Song, L.-L. Wang, X. Chen, J.-F. Jia, Z. Fang, X. Dai, W.-Y. Shan, S.-Q. Shen, Q. Niu, X.-L. Qi, S.-C. Zhang, X.-C. Ma, Q.-K. Xue, *Nature Phys.* **6**, 584 (2010).
19. T. Kernreiter, M. Governale, U. Zuelicke, and E. Hankiewicz, *Phys. Rev. X* **6**, 021010 (2016).
20. A. A. Zyuzin, M. D. Hook, and A. A. Burkov, *Phys. Rev. B* **83**, 245428 (2011).
21. M. V. Berry, *Journal of Physics A: Mathematical and General* **15**, 3693 (1982).
22. E. T. Whittaker and G. N. Watson, *A course of modern analysis: an introduction to the general theory of infinite processes and of analytic functions; with an account of the principal transcendental functions*, University press, Cambridge (1920).
23. M. Schultz, F. Heinrichs, U. Merkt, T. Colin, T. Skauli, and S. Løvold, *Semicond. Sci. Technol.* **11**, 1168 (1996).
24. S. S. Krishtopenko and F. Teppe, *Phys. Rev. B* **97**, 165408 (2018).
25. K.-M. Dantscher, D. A. Kozlov, M. T. Scherr, S. Gebert, J. Bärenfänger, M. V. Durnev, S. A. Tarasenko, V. V. Bel'kov, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretzky, Z. D. Kvon, J. Ziegler, D. Weiss, and S. D. Ganichev, *Phys. Rev. B* **95**, 201103 (2017).
26. M. Yakunin, S. Podgornykh, N. Mikhailov, and S. Dvoretzky, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **42**, 948 (2010).