

# Формирование связанных состояний и управление их локализацией в двойной квантовой точке на крае двумерного топологического изолятора с магнитными барьерами

© Е.А. Лаврухина, Д.В. Хомицкий, А.В. Тележников

Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского (физический факультет),  
603950 Нижний Новгород, Россия  
E-mail: ekaterina.a.lavrukhina@gmail.com

Поступила в Редакцию 6 мая 2023 г.

В окончательной редакции 11 июня 2023 г.

Принята к публикации 30 октября 2023 г.

Разработана модель локализованных состояний в двойной квантовой точке на крае топологического изолятора на основе квантовой ямы HgTe/CdTe, сформированной тремя магнитными барьерами. Исследованы особенности энергетического спектра, плотности вероятности и спиновой плотности квантовых состояний в зависимости от ориентации векторов намагниченности магнитных барьеров. Изучена локализация волновых функций слева и справа от точки антикроссинга в спектре и сделан вывод о возможности переключения между состояниями с областью локализации в разных квантовых точках при изменении поляризации среднего барьера.

**Ключевые слова:** топологический изолятор, магнитный барьер, двойная квантовая точка, локализация.

DOI: 10.61011/FTP.2023.07.56788.4943C

## 1. Введение

Топологические изоляторы (ТИ) составляют особый класс материалов, характеризующихся наличием запрещенной зоны для объемных состояний и хорошо проводящими краевыми состояниями, топологически защищенными от рассеяния на немагнитных примесях симметрией обращения времени [1–3]. Исследование топологически защищенных одномерных состояний в случае двумерного ТИ или поверхностных состояний для трехмерного ТИ представляет большой интерес, связанный с поиском методов управления такими состояниями и их локализацией, в том числе для реализации на их основе схем хранения и обработки информации. Известно, что невозможно осуществить локализацию таких состояний с помощью чисто электростатических барьеров за счет клейновского туннелирования безмассовых фермионов [4], поэтому для создания связанных состояний можно применять магнитные барьеры [5–7], которые частично разрушают защиту краевых состояний от рассеяния.

За последние пять лет опубликовано значительное число работ, посвященных взаимодействию геликоидальных краевых состояний в ТИ с различными барьерами и дефектами, в том числе магнитными моментами различного происхождения и локализации. Так, были рассмотрены эффекты от ядерных спинов на транспортные свойства краевых состояний [8], воздействие магнитного иона марганца на состояния квантовой точки в ТИ на основе HgTe [9], моделирование майорановских фермионов в сверхпроводнике на основе модели о магнитных барьерах на крае ТИ [10]. Были выполнены исследования фаз с высоким значением чисел Черна в структурах с ТИ и магнитными слоями [11], а также исследования влияния

точечных [12] и случайных распределений дефектов на рассеивание краевых состояний в ТИ [13]. Упомянутые работы, составляющие лишь незначительную долю от опубликованных, свидетельствуют о достаточно высокой актуальности тематики, связанной со взаимодействием краевых состояний в ТИ с магнитными барьерами и анализом возникающих здесь локализованных состояний. Несмотря на достаточно широкий охват задач, до сих пор, по нашему мнению, не выработаны единые взгляды на свойства и потенциальное применение локализованных состояний в системах вида квантовая точка, созданных на базе ТИ с помощью магнитных барьеров, что обуславливает наш интерес к данной проблеме, в частности к модели двойной квантовой точки, создаваемой тремя магнитными барьерами.

На протяжении ряда лет нами разрабатывается модель локализованных состояний в квантовых точках (КТ), сформированных на крае двумерного ТИ на основе квантовой ямы HgTe/CdTe, с помощью макроскопических магнитных барьеров конечной проницаемости. В частности, на базе известной модели взаимодействия краевого состояния с одиночной магнитной примесью [14] недавно наша модель была микроскопически обоснована на случай взаимодействия краевых состояний в ТИ с макроскопическим магнитным доменом (барьером), расположенным вблизи края ТИ [15]. Была показана возможность формирования конечного числа энергетических уровней в одномерной КТ, в том числе единственной пары уровней.

В данной работе мы продолжаем исследование связанных состояний, но уже в двойной КТ, сформированной тремя магнитными барьерами на крае двумерного ТИ на основе квантовой ямы HgTe/CdTe. Основной

мотивацией для исследования такой системы является возможность переключения между состояниями с локализацией волновой функции в левой и правой КТ путем изменения только поляризации намагниченности одного (центрального) барьера. В режиме антипараллельной ориентации векторов намагниченности крайних барьеров обнаружены точки антикроссинга, когда расстояние между уровнями минимально, а волновые функции локализованы с равной вероятностью в левой и правой КТ. Вне области антикроссинга наблюдается чередование локализации в правой и левой КТ при изменении ориентации намагниченности центрального барьера. Такое управляемое переключение между четко разграниченными в пространстве состояниями позволяет надеяться на использование исследуемой системы для хранения и обработки информации.

## 2. Модель

Рассматривается модель квантовых состояний в двойной КТ, сформированной магнитными барьерами на крае двумерного ТИ на основе квантовой ямы HgTe/CdTe. Двойная КТ образуется двумя крайними очень широкими магнитными барьерами с высотой (в энергетических единицах)  $M_1$  и  $M_2$ , а также центральным барьером высоты  $M_b$  и ширины  $L_b$ . В результате формируется левая КТ с шириной  $L_1$  и правая КТ с шириной  $L_2$ . Состояния в двойной КТ можно описать гамильтонианом, являющимся обобщением гамильтониана из работы [15] для рассматриваемого в данной работе случая трех магнитных барьеров:

$$H = Ak_y \sigma_z - M_1 S(-L_1 - y)(\sigma_x \cos \theta_1 + \sigma_y \sin \theta_1) - M_b (S(y) - S(y - L_b))(\sigma_x \cos \theta_b + \sigma_y \sin \theta_b) - M_2 S(y - L_2 - L_b)(\sigma_x \cos \theta_2 + \sigma_y \sin \theta_2). \quad (1)$$

Первое слагаемое в (1) соответствует эффективному гамильтониану для одномерных геликоидальных краевых состояний с постоянной величиной  $A = 360$  мэВ·нм, связанной со скоростью распространения состояний вдоль края ТИ на базе HgTe/CdTe [1–3]. Остальные слагаемые описывают влияние на краевые состояния со стороны магнитных барьеров, профиль каждого из которых аппроксимируется ступенчатой функцией  $S(y)$ . Подобные барьеры могут быть изготовлены из магнитных диэлектрических материалов (magnetic insulators), не создающих спиновой инжекции и не приводящих к гибридизации состояний магнетика и ТИ. В качестве примеров можно назвать соединения MnSe или EuS, применение которых в структурах с ТИ обсуждалось, например, в [16,17]. Линейные параметры  $L_1$ ,  $L_b$ ,  $L_2$  задают границы барьеров и ширину каждой КТ. Угловые параметры  $\theta_1$ ,  $\theta_b$ ,  $\theta_2$  определяют ориентации векторов намагниченности в плоскости  $(x, y)$  для каждого из барьеров, а энергетические параметры  $M_1$ ,  $M_b$ ,  $M_2$  представляют собой амплитуды обменного взаимодействия

краевых состояний с магнитными моментами барьеров [15]. Для гамильтониана (1) собственные функции имеют вид двухкомпонентных спиноров, определяемых в каждой области пространства выражениями

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi_{y < -L_1} = B \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{i\sqrt{M_1^2 - E^2} + E}{M_1} e^{i\theta_1} \end{pmatrix} e^{\frac{\sqrt{M_1^2 - E^2}}{A} y}, \\ \psi_{QD1} = \begin{pmatrix} C_1 e^{\frac{iE y}{A}} \\ C_2 e^{-\frac{iE y}{A}} \end{pmatrix}, \\ \psi_{0 < y < L_b} = D_1 \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{i\sqrt{M_b^2 - E^2} - E}{M_b} e^{i\theta_b} \end{pmatrix} e^{-\frac{\sqrt{M_b^2 - E^2}}{A} y} \\ + D_2 \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{i\sqrt{M_b^2 - E^2} + E}{M_b} e^{i\theta_b} \end{pmatrix} e^{\frac{\sqrt{M_b^2 - E^2}}{A} y}, \\ \psi_{QD2} = \begin{pmatrix} H_1 e^{\frac{iE y}{A}} \\ H_2 e^{-\frac{iE y}{A}} \end{pmatrix}, \\ \psi_{y > L_b + L_2} = J \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{i\sqrt{M_2^2 - E^2} - E}{M_2} e^{i\theta_2} \end{pmatrix} e^{-\frac{\sqrt{M_2^2 - E^2}}{A} y}. \end{array} \right. \quad (2)$$

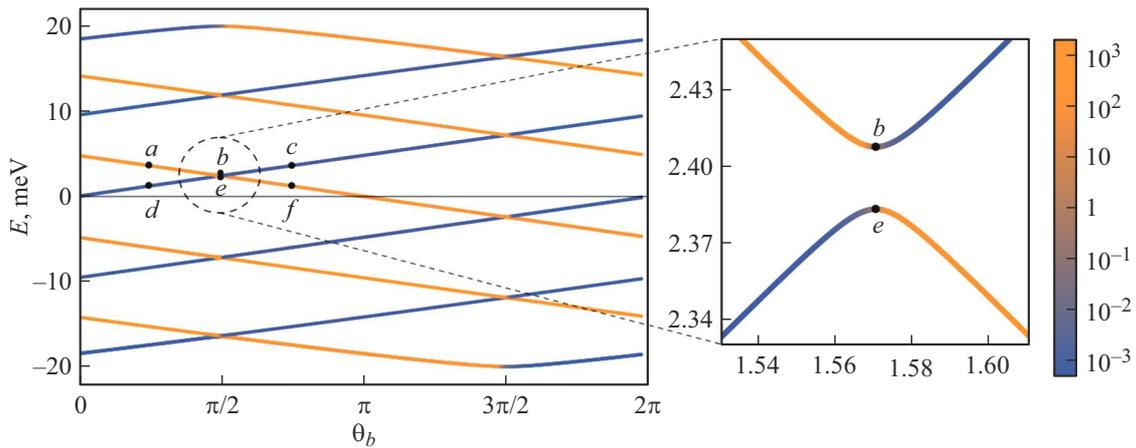
Воспользовавшись условиями сшивки волновой функции на границах барьеров  $y = -L_1$ ,  $y = 0$ ,  $y = L_b$  и  $y = L_b + L_2$ , мы получим систему линейных уравнений относительно коэффициентов  $B$ ,  $C_{1,2}$ ,  $D_{1,2}$ ,  $H_{1,2}$ ,  $J$ . Существование нетривиального решения системы (2) имеет место при условии равенства нулю ее определителя, что приводит к характеристическому уравнению на энергию  $E$  дискретных уровней в двойной КТ. Далее мы опишем решения системы (2) для таких значений параметров, при которых возможно управление областью локализации волновых функций.

## 3. Зависимость локализации волновой функции от поляризации барьеров

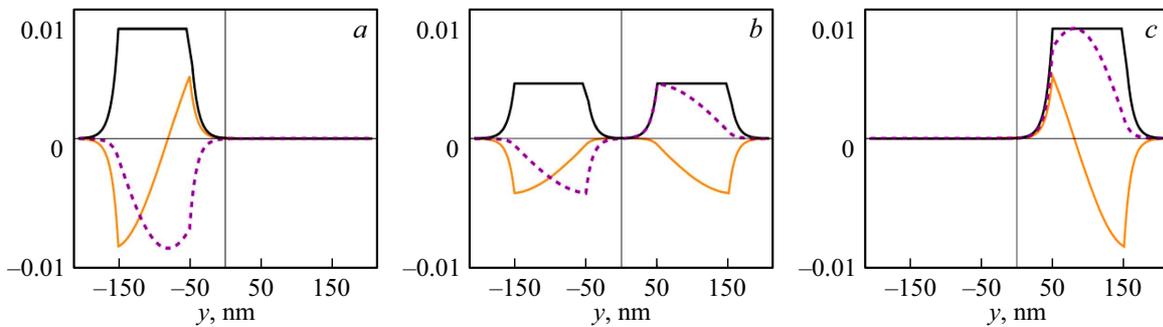
После нахождения коэффициентов для волновой функции (2) область ее локализации можно описать через сумму коэффициентов  $|C_1|^2 + |C_2|^2$  для левой КТ и через сумму  $|H_1|^2 + |H_2|^2$  для правой КТ. Введем отношение этих вероятностей

$$P \equiv \frac{|C_1|^2 + |C_2|^2}{|H_1|^2 + |H_2|^2}, \quad (3)$$

которое будет характеризовать локализацию соответствующей волновой функции: при  $P \gg 1$  волновая функция локализована в левой КТ, а при  $P \ll 1$  — в правой КТ. Возникает вопрос — каким образом меняется отношение (3) для данного энергетического уровня при изменении параметров системы. Рассмотрим режим антипараллельной ориентации намагниченности



**Рис. 1.** Энергетический спектр как функция угла намагниченности центрального барьера  $\theta_b$  при  $\theta_1 = 0, \theta_2 = \pi, L_{1,2,b} = 100$  нм,  $M_{1,2,b} = 20$  мэВ. Синим цветом показаны состояния с локализацией в правой КТ, когда отношение (4)  $P \ll 1$ , оранжевым — состояния с локализацией в левой КТ при  $P \gg 1$ . На вставке справа показана область антикроссинга для выделенной пунктиром зоны, когда волновые функции уровней ( $b, e$ ) локализованы одновременно в двух КТ. (Цветной вариант рисунка представлен в электронной версии статьи).



**Рис. 2.** Распределения вдоль структуры с двойной квантовой точкой для плотности вероятности  $|\psi|^2$  (черная сплошная линия) и спиновых плотностей  $S_x$  (сиреневая пунктирная линия),  $S_y$  (оранжевая сплошная линия) для уровней энергии ( $a, b, c$ ), отмеченных на рис. 2. (Цветной вариант рисунка представлен в электронной версии статьи).

крайних барьеров  $\theta_1 = 0, \theta_2 = \pi$ . На рис. 1 показана структура уровней системы в зависимости от ориентации намагниченности центрального барьера  $\theta_b$ . Остальные параметры системы  $L_{1,2,b} = 100$  нм,  $M_{1,2,b} = 20$  мэВ. На каждой линии цветом показано отношение (3). В оранжевой и желтой областях волновая функция практически полностью локализована в левой КТ, а в синей и голубой области — в правой КТ. Для точек спектра ( $a-c$ ) плотность вероятности и спиновая плотность показана далее на рис. 2. На вставке справа на рис. 1 показана область сближения уровней (антикроссинг) для выделенной слева пунктиром зоны, когда волновые функции уровней ( $b, e$ ) локализованы одновременно в двух квантовых точках. Из рис. 1 можно сделать вывод, что в спектре присутствует антикроссинг при ориентации намагниченности центрального барьера  $\theta_b = \frac{\pi}{2}$  и  $\theta_b = \frac{3\pi}{2}$ , при этом сближение уровней определяется проницаемостью центрального барьера. Раскладывая дисперсионное уравнение вблизи точки антикроссинга, можно получить оценку для величины щели на рис. 1 в виде  $\Delta \sim (AM/L)^{1/2} \exp(-LM/A)$ . Для параметров на рис. 1 мы получим, что  $\Delta = 0.033$  мэВ,

что является хорошим приближением для результатов представленного на рис. 1 численного расчета. Отметим, что щель  $\Delta$  имеет максимум при небольшой высоте барьера  $M_0 = A/2L = 1.8$  мэВ, равный  $\Delta_m \sim 1.5$  мэВ, и далее с ростом  $M$  спадает. Однако для приложений при создании кубитов такие низкие барьеры и широкие щели в спектре являются мало пригодными. Точка антикроссинга является точкой смены области локализации волновой функции для данного уровня, как это видно из рис. 1. Этот эффект представляется устойчивым к малым вариациям параметров системы, так как уровни одного дублета вдали от точек антикроссинга отделены значительной щелью от остальных дублетов, как это видно на рис. 1.

Локализация волновой функции для конкретных состояний может быть наглядно показана при визуализации плотности вероятности и плотности проекций спина. На рис. 2 в относительных единицах показаны плотность вероятности  $|\psi|^2$  и спиновые плотности  $S_{x,y} = \psi^+ \sigma_{x,y} \psi$  для точек ( $a, b, c$ ) в спектре на рис. 1. Абсолютная вероятность нахождения электрона в левой или правой КТ может быть получена интегрированием

$|\psi|^2$  по данной КТ и представляет собой величину, близкую к единице для рис. 2, *a*, *c* и к 1/2 в каждой точке для рис. 2, *b*, если пренебрегать вкладом от барьерной области. Третья проекция спина  $S_z$  для состояний (2) в нашей модели тождественно равна нулю [15]. Видно, как при переходе угла  $\theta_b$  через точку антикроссинга происходит смена области локализации волновой функции: она идет последовательно от (а) локализации в левой КТ, (b) локализации в обеих КТ в точке антикроссинга и (c) локализации в правой КТ. Аналогичный процесс наблюдается и для уровней (d–f) на рис. 1 с обратной последовательностью областей локализации. Как видно из рис. 1, интервал изменения  $\theta_b$  около точки антикроссинга для смены области локализации может быть относительно небольшим,  $\sim 20\text{--}30^\circ$ , что должно способствовать реализации данного механизма управления локализацией состояний.

#### 4. Заключение

Построена модель связанных состояний в двойной квантовой точке на крае топологического изолятора на основе квантовой ямы HgTe/CdTe, сформированной тремя магнитными барьерами. Рассмотрены особенности энергетического спектра, плотности вероятности и спиновой плотности в зависимости от параметров магнитных барьеров. Обнаружены точки антикроссинга в зависимости от поляризации центрального барьера, слева и справа от которых наблюдается локализация волновых функций в разных квантовых точках. Рассмотренные способы управления локализацией волновых функций на крае топологического изолятора говорят о перспективности использования таких структур для создания новых схем кубитов.

#### Благодарности

Авторы выражают признательность А.А. Конакову, В.Я. Алешкину и И.С. Бурмистрову за многочисленные полезные дискуссии.

#### Финансирование работы

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания FSWR-2023-0035.

#### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

#### Список литературы

- [1] B.A. Bernevig. *Topological Insulators and Topological Superconductors* (Princeton University Press, Princeton, 2013) p. 117.
- [2] X.-L. Qi, S.-C. Zhang. *Rev. Mod. Phys.*, **83**, 1057 (2011). DOI: 10.1103/RevModPhys.83.1057
- [3] B.A. Bernevig, T.L. Hughes, S.-C. Zhang. *Science*, **314**, 1757 (2006). DOI: 10.1126/science.1133734
- [4] M.I. Katsnelson, K.S. Novoselov, A.K. Geim. *Nature Physics*, **2**, 620 (2006). DOI: 10.1038/nphys384
- [5] C. Timm. *Phys. Rev. B*, **86**, 155456 (2012). DOI: 10.1103/PhysRevB.86.155456
- [6] G. Dolcetto, N. Traverso Ziani, M. Biggio, F. Cavaliere, M. Sasseti. *Phys. Rev. B*, **87**, 235423 (2013). DOI: 10.1103/PhysRevB.87.235423
- [7] G.J. Ferreira, D. Loss. *Phys. Rev. Lett.*, **111**, 106802 (2013). DOI: 10.1103/PhysRevLett.111.106802
- [8] C.-H. Hsu, P. Stano, J. Klinovaja, D. Loss. *Phys. Rev. B*, **97**, 125432 (2018). DOI: 10.1103/PhysRevB.97.125432
- [9] X. Li, Z. Wu, W. Lou. *Sci. Rep.*, **9**, 9080 (2019). DOI: 10.1038/s41598-019-45067-5
- [10] N. Traverso Ziani, C. Fleckenstein, L. Vigliotti, B. Trauzettel, M. Sasseti. *Phys. Rev. B*, **101**, 195303 (2020). DOI: 10.1103/PhysRevB.101.195303
- [11] Y.-X. Wang, F. Li. *Phys. Rev. B*, **104**, 035202 (2021). DOI: 10.1103/PhysRevB.104.035202
- [12] V.A. Sablikov, A.A. Sukhanov. *Phys. Rev. B*, **103**, 155424 (2021). DOI: 10.1103/PhysRevB.103.155424
- [13] S. Wolski, M. Inglot, C. Jasiukiewicz, K.A. Kouzakov, T. Masłowski, T. Szczepański, S. Stagracyński, R. Stagracyński, V.K. Dugaev, L. Chotorlishvili. *Phys. Rev. B*, **106**, 224418 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevB.106.224418
- [14] P.D. Kurilovich, V.D. Kurilovich, I.S. Burmistrov, M. Goldstein. *Phys. Rev. B*, **94**, 155408 (2016). DOI: 10.1103/PhysRevB.94.155408
- [15] D.V. Khomitsky, A.A. Konakov, E.A. Lavrukchina. *J. Phys.: Condens. Matter*, **34**, 405302 (2022). DOI: 10.1088/1361-648X/ac8407
- [16] W. Luo, X.-L. Qi. *Phys. Rev. B*, **87**, 085431 (2013). DOI: 10.1103/PhysRevB.87.085431
- [17] A.G. Mal'shukov. *Phys. Rev. B*, **90**, 045311 (2014). DOI: 10.1103/PhysRevB.90.045311

Редактор А.Н. Смирнов

#### Formation of bound states and control of their localization in a double quantum dot at the edge of the two-dimensional topological insulator with magnetic barriers

E.A. Lavrukchina, D.V. Khomitsky, A.V. Telezhnikov

National Research Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod,  
603950 Nizhny Novgorod, Russia

**Abstract** The model of the bound states in a double quantum dot formed by three magnetic barriers at the edge of two-dimensional topological insulator based on HgTe/CdTe quantum well is developed. The peculiarities of the energy spectrum, the probability density and the spin density of the quantum states are studied as a function of the orientation of the magnetization vector for the magnetic barriers. The wavefunction localization at the left and at the right of the anticrossing point in the spectrum is studied and the conclusion is made on the possibility of switching between the states with the localization area in different quantum dots by varying the polarization of the middle barrier.