Письма в ЖЭТФ, том 99, вып. 2, с. 110 – 114

Динамика электронных волновых пакетов в топологических изоляторах

В. Я. Демиховский[1], *А. В. Тележников*

Нижегородский государственный университет им. Лобачевского, 603950 Н.Новгород, Россия

Поступила в редакцию 17 декабря 2013 г.

Изучается динамика волновых пакетов, сформированных из электронных поверхностных (краевых) состояний в топологических диэлектриках. Аналитически и численно рассчитаны электронная и спиновая плотности и осцилляции типа *zitterbewegung* при различных значениях параметров гамильтониана. Рассмотрено влияние основных параметров пакетов (размеров, спиновой поляризации) на расщепление и изменение формы пакетов и осцилляции их средней скорости.

DOI: 10.7868/S0370274X1402009X

Квантовые состояния в топологических изоляторах подразделяются на так называемые объемные состояния, у которых энергетический спектр, как у обычных полупроводников, имеет запрещенную зону, и бесщелевые поверхностные состояния, локализованные вблизи границ двумерного или трехмерного электронного газа. В такой ситуации электроны, лежащие на поверхности 3D топологического изолятора, находятся в проводящем состоянии, а электроны в объеме не проводят электрический ток. С помощью адиабатически медленных внешних воздействий, не изменяющих значений топологических инвариантов, топологические изоляторы не могут быть переведены в состояния обычных изоляторов или полупроводников [1]. Необходимым условием существования фазы топологического изолятора является присутствие сильного спин-орбитального взаимодействия, а также наличие симметрии по отношению к инверсии времени. Квантовые состояния на поверхности 3D топологических изоляторов есть безмассовые 2D-фермионы с дираковским спектром (см., например, [1]). Чтобы эти состояния были топологически защищенными, необходимо, чтобы число дираковских конусов спектра было нечетным. Экспериментально (с помощью техники спектроскопии с угловым разрешением – ARPES) установлено, что в кристаллах Bi_2Se_3, Bi_2Te_3 существует только один дираковский конус.

В последние годы двумерные и трехмерные топологические изоляторы широко исследовались экспериментально (см. [2]). Изначально поведение, характерное для топологического изолятора, было обнаружено в квантовых ямах HgTe/CdTe. Экспериментально свойства 3D топологических изоляторов были впервые исследованы в сплаве $Bi_{1-x}Sb_x$ со сложной структурой, а также в кристаллах Bi_2Se_3 и Bi_2Te_3 (см. обзор [3]). Экзотические поверхностные состояния в этих материалах исследовались с помощью ARPES. В этой технике высокоэнергетичные фотоны служат для того, чтобы выбить электроны из кристалла и затем определить их импульс. Кроме того, при экспериментальном исследовании топологических изоляторов применялись методы СТМ, СТС и ряд оптических методов.

Помимо перечисленных выше топологических изоляторов, были предсказаны топологические изоляторы, в которых отсутствует спин-орбитальное взаимодействие. Это так называемые топологические кристаллические изоляторы [4]. Как установлено недавно в работе [5], к данному классу соединений относятся сплавы $Pb_{1-x}Sn_xSe$ и кристаллы SnTe.

В настоящей работе изучается пространственно-временная эволюция электронных волновых пакетов, сформированных в тонких пленках и на поверхности 3D топологических изоляторов. Эволюция таких пакетов определяется спецификой граничных (поверхностных) квантовых состояний топологического изолятора, его энергетическим спектром, а также начальными размерами и спиновой поляризацией. Установлена роль основных параметров гамильтониана, определяющих форму электронной и спиновой плотности и характер осцилляций типа *zitterbewegung* (ZB). Для аналитических расчетов использован метод стационарной фазы.

В работе [6] показано, что гамильтониан для 3D топологического изолятора Bi_2Se_3, записанный как матрица 4×4, имеет вид

[1])e-mail: demi@phys.unn.ru

$$\hat{H} = (C - D_1\partial_z^2 + D_2k^2) + \begin{pmatrix} h(A_1) & A_2k_-\sigma_x \\ A_2k_+\sigma_x & h(-A_1) \end{pmatrix}, (1)$$

где $h(A_1) = (M + B_1\partial_z^2 - B_2k^2)\sigma_z - iA_1\partial_z\sigma_x$, σ_i – матрицы Паули, $k_\pm = k_x \pm ik_y$ и $k^2 = k_x^2 + k_y^2$. Параметры гамильтониана (1) следующие [7]: $M = 0.28$ эВ, $A_1 = 2.2$ эВ$\cdot$Å, $A_2 = 4.1$ эВ$\cdot$Å, $B_1 = 10$ эВ$\cdot$Å^2, $B_2 = 56.6$ эВ$\cdot$Å^2, $C = -0.0068$ эВ, $D_1 = 1.3$ эВ$\cdot$Å^2, $D_2 = 19.6$ эВ$\cdot$Å^2.

Анализ структуры волновой функции и спектра поверхностных состояний удобно проводить с помощью так называемого эффективного гамильтониана $\hat{H}_{\text{eff}}$. Чтобы установить вид эффективного гамильтониана в полубесконечном топологическом 3D-изоляторе, необходимо, положив $k_x = k_y = 0$, найти собственные функции гамильтониана (1), удовлетворяющие граничному условию $\Psi(0) = 0$ [3]:

$$\hat{H}_{\text{eff}}(k) = -\hbar v_F(k_x\hat{\sigma_y} - k_y\hat{\sigma_x}). \qquad (2)$$

Нетрудно убедиться в том, что в этой модели поверхностные моды на границе массивного 3D топологического диэлектрика существуют только при выполнении неравенства $M/B_1 > 0$. Это неравенство выполняется, например, в Bi_2Se_3 и Bi_2Te_3. В данной ситуации волновые пакеты, как и стационарные поверхностные состояния, являются топологически защищенными, поскольку для них рассеяние назад на немагнитной примеси запрещено [8]. Таким образом, при выполнении указанного неравенства динамика электронных волновых пакетов на поверхности 3D топологического изолятора будет иметь те же особенности, что и в двумерной системе со взаимодействием Рашбы [9]. Начальный пакет с произвольной ориентацией спина в процессе эволюции будет расщепляться на две части, распространяющиеся в противоположных направлениях со скростями $\pm v_{\text{F}}$. Если же параметры гамильтониана (1) таковы, что $M/B_1 < 0$, то поверхностной волны со спектром, лежащим внутри запрещенной зоны диэлектрика, не существует.

Теперь рассмотрим эволюцию электронного пакета в тонкой пленке 3D топологического изолятора. В этом случае эффективный гамильтониан, описывающий поверхностные состояния вблизи Г-точки зоны Бриллюэна, можно найти, также сначала полагая в (1) $k_x = k_y = 0$, а затем решая уравнение Шредингера с граничными условиями $\Psi(z = \pm L/2) = 0$. В результате во втором порядке по k_x и k_y эффективный гамильтониан будет иметь следующую матричную форму [6]:

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \begin{pmatrix} h_+(k) & 0 \\ 0 & h_-(k) \end{pmatrix}, \qquad (3)$$

где

$$\hat{h}_{\tau_z}(k) = E_0 - Dk^2 - \hbar v_{\text{F}}(k_x\hat{\sigma_y} - k_y\hat{\sigma_x}) + \\ + \tau_z(\Delta/2 - Bk^2)\hat{\sigma_z}. \qquad (4)$$

Здесь k_x, k_y – хорошие квантовые числа, $\tau_z = \pm 1$, что связано с двукратным вырождением спектра, а величины E_0, D, v_{F}, B и Δ являются функциями толщины пленки. Явную зависимость этих величин от толщины пленки L можно найти в работе [6]. Константа Δ в эффективном гамильтониане (4) определяет энергетическую щель в спектре поверхностных состояний. Появление энергетической щели в спектре поверхностной моды (в Г-точке зоны Бриллюэна) связано, очевидно, с туннелированием носителей между двумя поверхностными состояниями, лежащими на противоположных границах пленки. Если волновые функции на двух противоположных границах перекрываются, то величина энергетической щели, вообще говоря, экспоненциально зависит от толщины пленки. Могут также наблюдаться слабые осцилляции энергетической щели при изменении толщины пленки 3D топологического изолятора . Слагаемое Bk^2 в (4) ответственно за спин-орбитальное взаимодействие.

Энергетический спектр гамильтониана (4) и его собственные функции с нормой $\|U_\pm(k)\|$ в этом случае имеют вид

$$E_{\pm,k_x,k_y} = E_0 - Dk^2 \pm \hbar\omega(k), \qquad (5)$$

$$\varphi_{\pm,k_x,k_y}(x,y) = \frac{\exp(ik_xx + ik_yy)}{\sqrt{2\pi}}|U(k)\rangle_\pm, \qquad (6)$$

$$|U(k)\rangle_\pm = \frac{1}{\|U_\pm(k)\|}\begin{pmatrix} (\Delta/2 - Bk^2)\tau_z \pm \hbar\omega(k) \\ -i\hbar v_{\text{F}}k_+ \end{pmatrix}, (7)$$

где знаки "+" и "−" отвечают зоне проводимости и валентной зоне спектра, $\omega(k) = \frac{1}{\hbar}\sqrt{(\Delta/2 - Bk^2)^2 + (\hbar v_{\text{F}}k)^2}$ – частота перехода между зоной проводимости и валентной зоной.

Спиновые плотности $\overline{s}_i(x,y,t) = \frac{\hbar}{2}\langle\varphi_{\pm,k_x,k_y}(x,y)|\sigma_i|\varphi_{\pm,k_x,k_y}(x,y)\rangle$ в поверхностных зонах могут иметь различный знак. При этом направление спина при малых значениях k, т.е. вблизи Г-точки зоны Бриллюэна, определяется знаком энергетической щели Δ, а при больших значениях k зависит от знака квадратичной по k величины спин-орбитального взаимодействия. Точку обращения $\overline{s}_z$ в нуль можно найти из условия $|\Delta| = 2|B|k^2$, что реализуется лишь в случае, когда константы Δ и B имеют одинаковый знак. Если толщина пленки

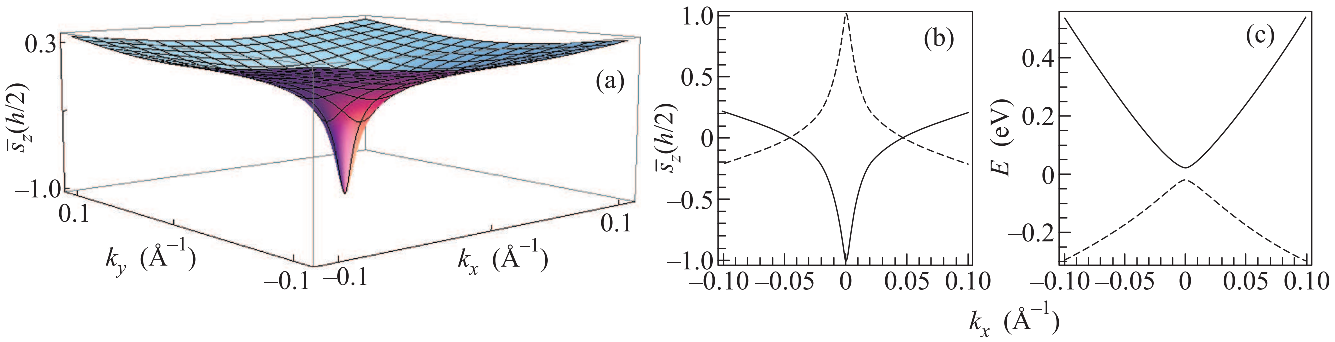

Рис. 1. (a) – Спиновая плотность $\bar{s}_z(k_x, k_y)$ стационарных состояний зоны проводимости гамильтониана (4) для $\tau_z = 1$. (b) – Сечение этой функции плоскостью $k_y = 0$. (c) – Энергетический спектр. Сплошная линия отвечает состояниям зоны проводимости, пунктирная – состояниям валентной зоны (на рис. a не показана). Параметры гамильтониана заимствованы из работы [6]: толщина пленки $l = 32$ Å, $\Delta = -0.045$ эВ, $B = -11$ эВ $\cdot$ Å^2, $D = -12.2$ эВ $\cdot$ Å^2

равна 32 Å, то согласно результатам работы [6] смена знака происходит в точке $k = 0.045$ Å^{-1} (см. рис. 1).

Рассмотрим для простоты динамику одномерного пакета ($k_y = 0$, $k_x \equiv k$). Тогда эволюция произвольного начального состояния $\Psi(x)$ во времени дается выражением

$$\Psi(x,t) = \sum_{\pm} \int_{-\infty}^{\infty} C_{\pm}(k)\varphi_{\pm,k}(x) \exp\left(-\frac{iE_{\pm,k}t}{\hbar}\right) dk, \quad (8)$$

в котором коэффициенты $C_{\pm}(k)$ определяются функцией начального состояния:

$$C_{\pm}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \langle U(k)|_{\pm} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ikx)\Psi(x,0)dx. \quad (9)$$

Пусть начальный волновой пакет имеет гауссову форму с поляризацией спина по оси z:

$$\Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{d\sqrt{\pi}}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \exp\left(-\frac{x^2}{2d^2}\right), \quad (10)$$

где d – ширина пакета. Согласно (8) эволюция такого пакета во времени описывается выражением

$$\begin{pmatrix} \Psi_1(x,t) \\ \Psi_2(x,t) \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{d}{2\pi^{3/2}}} \exp\left(-\frac{iE_0t}{\hbar}\right) \times$$
$$\sum_{\pm} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_{\pm}(k) \exp\left(i\left\{kx + \left[Dk^2 \mp \hbar\omega(k)\right] t/\hbar\right\}\right) dk, \quad (11)$$

где плавный неосциллирующий множитель под знаком интеграла есть

$$\Phi_{\pm}(k) = \left[(\Delta/2 - Bk^2)\tau_z \pm \hbar\omega(k)\right] \exp\left[-\frac{(kd)^2}{2}\right] \times$$
$$\times \frac{1}{\|U_{\pm}(k)\|^2} \begin{pmatrix} (\Delta/2 - Bk^2)\tau_z \pm \hbar\omega(k) \\ -i\hbar v_{\mathrm{F}} k \end{pmatrix}. \quad (12)$$

Интеграл в выражении (11) можно рассчитать с помощью метода стационарной фазы. Действительно, при больших значениях t и x фаза в показателе экспоненты быстро изменяется при небольшом изменении переменной интегрирования k. Быстрые осцилляции действительной и мнимой частей подынтегральной функции приводят к взаимному сокращению вкладов. При этом основной вклад возникает от тех областей, где показатель экспоненты изменяется медленно. Такие экстремальные точки показателя экспоненты можно найти из условия

$$\frac{\partial}{\partial k}\left[kx + \frac{Dtk^2}{\hbar} \mp t\omega(k)\right] = 0. \quad (13)$$

Тогда значение интеграла можно приближенно получить, вынося функцию $\Phi_{\pm}(k)$ в экстремальной точке за знак интеграла. В частности, при $\Delta = 0$, $B = 0$, когда фаза экстремальна в точках $k = \frac{(x \mp v_F t)\hbar}{2|D|t}$, имеем

$$\Psi_1(x,t) = f_+(x,t) + f_-(x,t),$$
$$\Psi_2(x,t) = i[f_+(x,t) - f_-(x,t)], \quad (14)$$

где функции $f_{\pm}(x,t)$ определены как

$$f_{\pm}(x,t) = \sqrt{\frac{\hbar d}{8i|D|\sqrt{\pi}t}} \times$$
$$\times \exp\left\{-\frac{[(x \pm v_{\mathrm{F}}t)\hbar d]^2}{8|D|^2t^2} + i\frac{(x \pm v_{\mathrm{F}}t)^2\hbar}{4|D|t}\right\}. \quad (15)$$

Отсюда следует, что начальный волновой пакет расщепляется на две одинаковые части, расплывающиеся и движущиеся в разные стороны со скоростями $\pm v_{\mathrm{F}}$. При этом $|\Psi_1|^2$ и $|\Psi_2|^2$ осциллируют с периодом $\Delta x = 2\pi|D|/\hbar v_{\mathrm{F}}$, однако их сумма не содержит осцилляций. Этот результат совпадает с полученным ранее в работе [9].

Когда в топологическом изоляторе параметры гамильтониана B и Δ не равны нулю, приближенное выражение для точек стационарной фазы в (13) находится аналитически в области малых значений k:

$$k_{\mp} = -\frac{\hbar x}{2t\left\{D \mp [(\hbar v_{\mathrm{F}})^2 - B\Delta]/|\Delta|\right\}}. \qquad (16)$$

Данное разложение справедливо для достаточно широких волновых пакетов: $d \gg d_c = \frac{\hbar v_{\mathrm{F}}}{|\Delta|}\sqrt{|1 + \frac{B\Delta}{B\Delta - \hbar v_{\mathrm{F}}{}^2}|}$. Для них с помощью метода стационарной фазы удается приближенно вычислить интеграл (11). После этого становится ясно, что широкий волновой пакет практически не расщепляется на две части. Период же осцилляций электронной плотности теперь зависит от x и t:

$$\Delta x \approx \frac{2\pi t}{x\hbar|\Delta|}\frac{(D\Delta)^2 - [(\hbar v_F)^2 - B\Delta]^2}{(\hbar v_{\mathrm{F}})^2 - B\Delta}. \qquad (17)$$

Видно, что с ростом x период осцилляций уменьшается. Это иллюстрирует рис. 2, на котором представлен результат численного расчета электронной плотности $\rho = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2$ пакета с начальной формой (10) и шириной $d = 500\,\text{Å} \gg d_c \simeq 90\,\text{Å}$. На графике отчетливо видны характерные осцилляции, период которых можно оценить с помощью выражения (17).

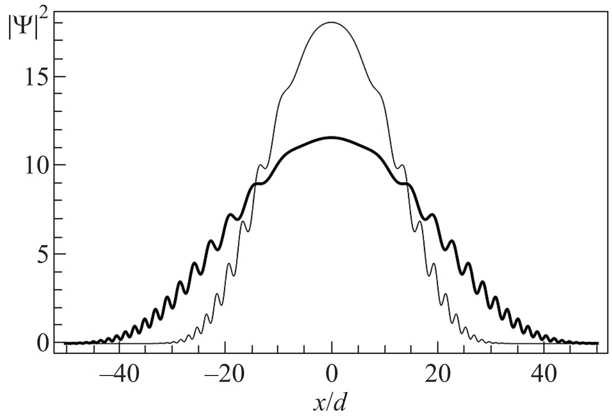

Рис. 2. Электронная плотность в широком одномерном волновом пакете с $d = 500\,\text{Å}$ и начальной формой (10) в моменты времени $t = 3.6 \cdot 10^{-12}$ с (тонкая линия) и $5.7 \cdot 10^{-12}$ с (толстая линия). Параметры гамильтониана те же, что на рис. 1

В случае узкого волнового пакета ($d \leq d_c$) расчет электронной и спиновой плотности может быть выполнен численно. Поскольку в таком пакете представлен достаточно широкий диапазон волновых векторов, определение точек стационарной фазы в (16) является некорректным. С другой стороны, наличие больших волновых векторов приводит к тому, что скорость разбегания волновых пакетов оказывается больше скорости их расплывания. В результате наблюдается расщепление первоначального пакета (10) на две части, движущиеся в разных направлениях. На рис. 3 представлен результат численного расчета электронной плотности узкого волнового пакета с начальным размером $d = 50\,\text{Å}$ (параметры гамильтониана здесь те же, что и на рис. 2).

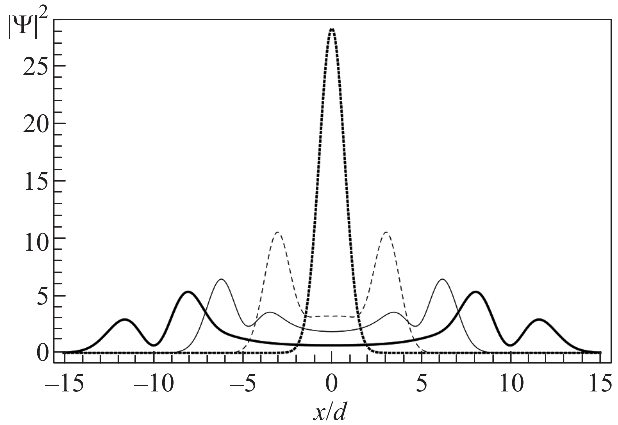

Рис. 3. Электронная плотность в узком волновом пакете с $d = 50\,\text{Å}$ и начальной формой (10) в моменты времени $t = 0$ с (пунктир), $2.4 \cdot 10^{-14}$ с (штриховая линия), $4.9 \cdot 10^{-14}$ с (тонкая сплошная линия) и $8.9 \cdot 10^{-14}$ с (толстая сплошная линия). Параметры гамильтониана те же, что на рис. 1

Можно ожидать, что из-за наличия двух ветвей спектра, разделенных энергетической щелью, в топологических изоляторах будет наблюдаться явление осцилляций центров волновых пакетов, т.е. ZB (*trembling motion*). Используя определение $\hat{v} = \dot{\mathbf{r}} = i/\hbar[\hat{H}, \hat{\mathbf{r}}]$, с учетом (4) найдем компоненты оператора скорости в топологическом изоляторе:

$$\begin{aligned} \hat{v}_x &= -\frac{2Dk_x}{\hbar} - \frac{2Bk_x}{\hbar}\sigma_z - v_{\mathrm{F}}\sigma_y, \\ \hat{v}_y &= -\frac{2Dk_y}{\hbar} - \frac{2Bk_y}{\hbar}\sigma_z + v_{\mathrm{F}}\sigma_x. \end{aligned} \qquad (18)$$

Заметим также, что компоненты волновой функции (11) зависят только от координаты x, поэтому $\overline{p}_y = p_y = 0$. При этом, однако, оказывается, что $\overline{v}_y(t) \neq 0$. Действительно, проводя численный расчет скорости $\overline{v}_y(t)$, определенной в (18), по состояниям с волновой функцией (11), видим, что компонента средней скорости волнового пакета осциллирует вдоль оси, перпендикулярной к направлению распространения волнового пакета. Это связано с тем, что начальный волновой пакет (10) является суперпозицией состояний валентной зоны $E_{-,k}$ и зоны проводимости $E_{+,k}$ гамильтониана (4). Частота таких осцилляций имеет порядок $\omega_{ZB} = 2\omega(k_0)$. Зависимость средней скорости волнового пакета $\overline{v}_y(t)$ от времени иллюстрирует рис. 4.

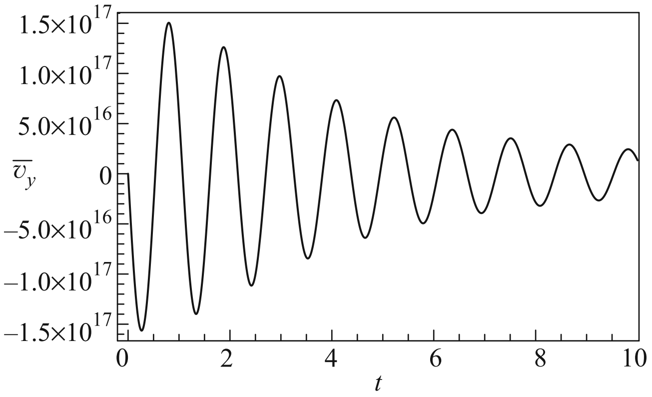

Рис. 4. Зависимость средней скорости одномерного волнового пакета $v_y(t)$ от времени со средним импульсом $k_0 = 1.5 \cdot 10^{-4}$ Å^{-1}. Ширина начального волнового пакета $d = 500$ Å. Время отложено в единицах $\tau = 8.1 \cdot 10^{-14}$ с. Частота осцилляций здесь имеет порядок $2\omega(k_0)$. Параметры гамильтониана те же, что на рис. 1

Заметим, что в условиях, когда Δ и B равны нулю ситуация та же, что и для электронов со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы [9], т.е. частота ZB-осцилляций пропорциональна среднему импульсу волнового пакета k_0 и равна $\omega_{ZB} = 2k_0 v_F$. Если $\Delta = 0$, а $B \neq 0$, то ZB-осцилляции наблюдаются только для пакета со средним импульсом $\hbar k_0$.

Таким образом, характер пространственно-временной эволюции электронных волновых пакетов в топологических изоляторах определяется топологией стационарных состояний, в том числе распределением электронной и спиновой плотности в основном состоянии. Экспериментальное наблюдение обсуждаемых в данной работе особенностей эволюции волновых пакетов в массивных кристаллах и в тонких пленках позволит определить их принадлежность к классу топологических изоляторов.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ # 13-02-00784.

1. M. Z. Hasan and C. L. Kane, Rev. Mod. Phys. **82**, 3045 (2010).
2. M. König, H. Buhmann, L. W. Molenkampet, T. Hughes, Ch.-X. Liu, X.-L. Qi, and Sh.-Ch. Zhang, J. Phys. Soc. Jpn. **77**, 031007 (2008); M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi, and Sh.-Ch. Zhang, Science **318**, 766 (2007).
3. H. L. Qi and S. H. Zhang, Rev. Mod. Phys. **83**, 1057 (2011).
4. L. Fu, Phys. Rev. Lett. **106**, 106802 (2011).
5. Y. Tanaka, Z. Ren, T. Sato, K. Nakayama, S. Souma, T. Takahashi, Kouji Segawa, and Yoichi Ando, Nat. Phys. **8**, 800 (2012).
6. H. Z. Lu, W. Y. Shan, W. Yao, Q. Niu, and Sh.-Q. Shen, Phys. Rev. B **81**, 115407 (2010).
7. H. J. Zhang, C. X. Liu, X. L. Qi, X. Dai, Zh. Fang, and Sh.-Ch. Zhang, Nat. Phys. **5**, 438 (2009).
8. S. Q. Shen, *Topological Insulators. Dirac Equation in Condensed Matters*, Shpringer Series in Solid-State Sciences (2012).
9. V. Ya. Demikhovskii, G. M. Maksimova, and E. V. Frolova, Phys. Rev. B **78**, 115401 (2008).