Письма в ЖЭТФ, том 101, вып. 7, с. 501 – 504 © 2015 г. 10 апреля

Нестандартная динамика электронов в топологических изоляторах, помещенных в магнитное поле: эффекты фазы Берри

В. Я. Демиховский[1], *Р. В. Туркевич*

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

Поступила в редакцию 12 февраля 2015 г.

Изучается квазиклассическая динамика носителей тока, движущихся по поверхности 3D топологического изолятора типа Bi_2Te_3, помещенного в постоянное магнитное поле. Учтены эффекты, связанные с изменением симметрии электронных изоэнергетических поверхностей (контуров), а также с ненулевой кривизной Берри. Показано, что в отличие от стандартной динамики электронов, движущихся в постоянном и однородном магнитном поле по траекториям, определяемым из условия $E(k) = \mathrm{const}$ и $p_z = \mathrm{const}$, возникают эффекты, связанные как с появлением аномальной скорости, пропорциональной кривизне Берри, так и с искривлением траекторий, связанным с добавкой к энергии, пропорциональной орбитальному магнитному моменту волнового пакета. Это должно привести к изменению условий циклотронного резонанса поверхностных электронов. И хотя в магнитном поле разрушаются симметрия к инверсии времени и топологический порядок, исследование циклотронного резонанса позволяет определить, являлся ли данный изолятор тривиальным или нетривиальным в нулевом поле.

DOI: 10.7868/S0370274X15070061

Как следует из проведенных в последние годы теоретических и экспериментальных исследований, кривизна Берри и орбитальный магнитный момент волновых пакетов наряду с зонным спектром носителей определяют их динамику во внешнем электромагнитном поле, а также в деформированном кристалле [1, 2]. При этом, как было показано в работах [3, 4], временная эволюция средней координаты $r_c(t)$ и среднего импульса $p_c(t)$ волнового пакета определяются из квазиклассических уравнений движения. Учет кривизны Берри необходим также при расчетах многих других важных характеристик , в частности нетривиальных условий квантования циклотронных орбит в магнитном поле [5]. В настоящей работе рассматриваются уравнения движения волнового пакета в 3D топологических изоляторах типа Bi_2Te_3, находящихся во внешнем постоянном и однородном магнитном поле.

Как известно, энергетический спектр носителей тока в топологических изоляторах характеризуется рядом особенностей. Так, изоэнергетические контуры, соответствующие электронам, находящимся на поверхности топологического изолятора, под влиянием периодического потенциала кристаллической решетки превращаются из окружностей в кривые с симметрией шестого порядка. Данный эффект обсуждался в работе [6]. Гексагональное искривление ферми-поверхности в топологических изоляторах Bi_2Te_3 [7], Bi_2Se_3 [8] и $Pb(Bi,Se)_2Te_4$ [9] было обнаружено с помощью техники ARPES, т.е. спектроскопии с угловым разрешением.

В настоящей работе рассматриваются эффекты нестандартной электронной динамики волновых пакетов, составленных из поверхностных состояний в топологических изоляторах, без учета спина частиц. Согласно [6] электронные состояния в топологическом изоляторе Bi_2Te_3 с учетом гексагонального искривления электронного спектра поверхностных состояний описываются гамильтонианом

$$H = \hbar\nu_f(k_x\sigma_y - k_y\sigma_x) + \hbar\frac{\lambda}{2}(k_+^3 + k_-^3)\sigma_z + \Delta\sigma_z, \quad (1)$$

который содержит член, пропорциональный третьей степени k. Здесь $\lambda = 3.7\cdot10^7$ см^3/с, $\nu_f = 3.86\cdot10^7$ см/с, $k_\pm = k_x \pm ik_y$, σ_y – матрицы Паули. Этот гамильтониан обладает симметрией C_{3V}. Электронный спектр гамильтониана (1) имеет вид

$$E_0(k_x, k_y) = \pm\sqrt{\hbar^2k^2\nu^2 + [\lambda k^3\cos(3\theta) + \Delta]^2}, \quad (2)$$

где θ – полярный угол, а знаки "плюс" и "минус" отвечают зоне проводимости и валентной зоне соответственно. Такая модель не учитывает наличие спина электронов.

Лагранжиан движущегося волнового пакета, центрированного в точках $\mathbf{r}_c$ и $\mathbf{k}_c$, записывается в форме

$$L(\mathbf{r}_c, \mathbf{k}_c, t) = \langle\Psi\left| i\hbar\frac{d}{dt} - \widehat{H}\right|\Psi\rangle, \quad (3)$$

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

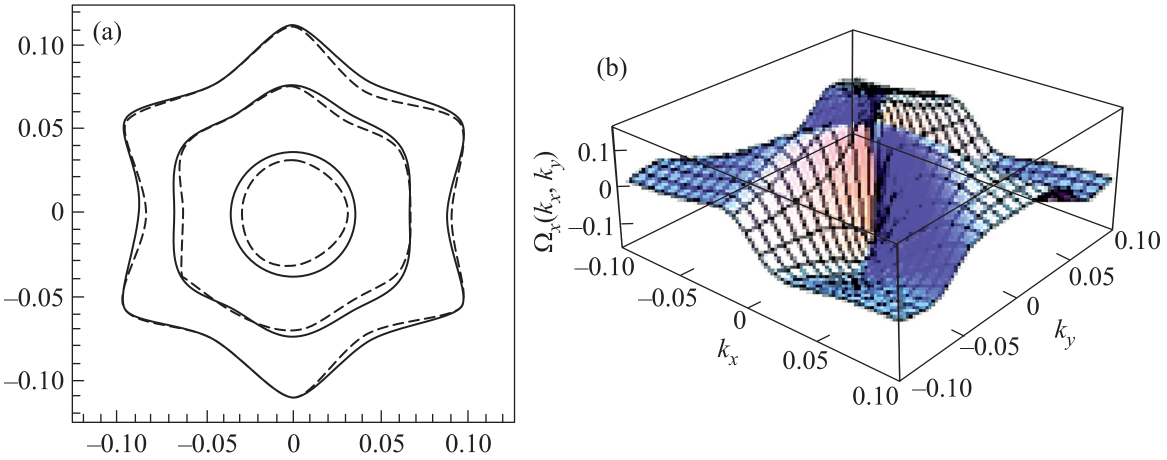

Рис. 1. (a) – Изоэнергетические линии $E_0 = \text{const}$ (сплошные линии) и $E_m = \text{const}$ (штриховые линии). (b) – Кривизна Берри, отложенная в единицах Ω_z/l_b^2 (при $B = 1\,\text{МГс}$) и k в Å^{-1}

где $|\Psi\rangle$ – функция волнового пакета. Квазиклассические уравнения Эйлера–Лагранжа для $\mathbf{r}_c$ и $\mathbf{k}_c$, описывающие движение двумерного пакета по циклотронной орбите, были получены в работах [3, 4] путем минимизации функционала действия

$$S[\mathbf{r}_c(t), \mathbf{k}_c(t)] = \int dt' L(t'). \qquad (4)$$

Эти уравнения имеют следующий вид

$$\dot{\mathbf{k}} = -\frac{e}{c\hbar}[\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}], \qquad (5а)$$

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E_m}{\partial \mathbf{k}} - [\dot{\mathbf{k}} \times \mathbf{\Omega}], \qquad (5б)$$

где $\mathbf{B}$ – вектор внешнего магнитного поля, $\mathbf{\Omega} = (0, 0, \Omega_z)$ – кривизна Берри, которая в нашем случае имеет только z-проекцию. В стандартных уравнениях движения в магнитном поле электронная траектория определяется из условия $E_0 = \text{const}$, а проекция импульса на направление магнитного поля $p_z = \text{const}$. В отличие от стандартного случая в модели с гамильтонианом (1) сохраняется энергия $E_m = E_0 - \mathbf{m} \cdot \mathbf{B}$, а траектория определяется из условия $E_m = \text{const}$. Энергия E_m состоит из двух слагаемых: невозмущенной электронной энергии E_0 и энергии $-\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}$ волнового пакета, вращающегося в магнитном поле вокруг собственного центра масс. Кроме того, как следует из уравнения (5б), электронная скорость приобретает дополнительное слагаемое, пропорциональное z-компоненте кривизны Берри.

В топологических изоляторах, где электроны описываются гамильтонианом (1), явные выражения для кривизны Берри и орбитального магнитного момента имеют следующий вид:

$$\Omega_z(k_x, k_y) = -\frac{\hbar^2\nu^2(\Delta - 2\lambda\hbar k_x^3 + 6\lambda\hbar k_x k_y^2)}{2\{\hbar^2\nu^2(k_x^2 + k_y^2) - [\Delta + \hbar\lambda(k_x^3 - 3k_x k_y^2)]^2\}^{3/2}}, \qquad (6)$$

$$m_z(k_x, k_y) = -\frac{e}{2\hbar c}\frac{\hbar^2\nu^2(\Delta - 2\lambda\hbar k_x^3 + 6\lambda\hbar k_x k_y^2)}{\{\hbar^2\nu^2(k_x^2 + k_y^2) - [\Delta + \hbar\lambda(k_x^3 - 3k_x k_y^2)]^2\}}. \qquad (7)$$

Кривизна Берри и магнитный момент в валентной зоне и зоне проводимости связаны как $\Omega_V(k) = -\Omega_C(k)$, $m_V(k) = m_C(k)$.

За исключением размерного множителя, выражение для кривизны Берри (6) отличается от выражения (7) для m_z лишь степенью выражения в круглых скобках в знаменателе (степень $3/2$ вместо 1). Если не учитывать эффект искривления траекторий в гамильтониане, то кривизна Берри и орбитальный магнитный момент пропорциональны величине Δ. При учете искривления траекторий кривизна Берри и орбитальный магнитный момент не обращаются в нуль даже при $\Delta = 0$. При обходе по циклотронной траектории в k-пространстве кривизна Берри шесть раз изменяет знак. Из выражений (2) и (7) следует, что невозмущенный электронный спектр E_0 имеет поворотную ось 6-го порядка, а энергия $-\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}$ – ось симметрии 3-го порядка. Магнитная энергия обычно меньше энергии электронного спектра, и ей можно пренебрегать. Однако в сильном магнитном поле (в случае Bi_2Te_3 при $B \sim 1\,\text{МГс}$) эта энергия становится значительной.

Следует заметить, что если стандартные уравнения движения заряженной частицы в магнитном поле не содержат постоянной Планка, то уравне-

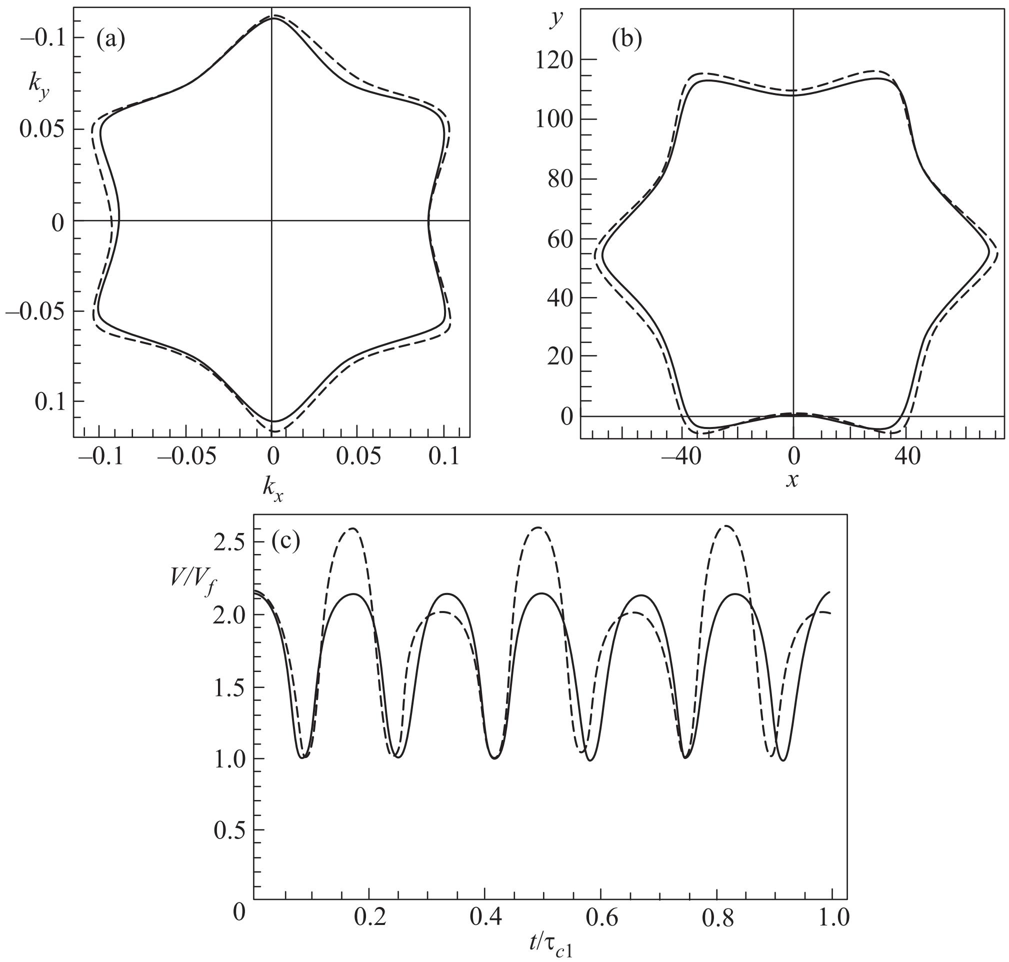

Рис. 2. Электронные траектории в k-пространстве (a) и в r-пространстве (b). (c) – Зависимости модуля скорости от времени с учетом (сплошная линия) и без учета (штриховая линия) кривизны Берри и энергии, пропорциональной магнитному моменту

ния (5a), (5б) включают дополнительные члены, связанные с виртуальными переходами в соседние зоны: аномальная скорость $-[\dot{\mathbf{k}} \times \mathbf{\Omega}]$ и добавочная энергия электрона в магнитном поле – $\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}$ пропорциональны первой степени постоянной Планка $\hbar$.

В этом случае энергия E_m обладает поворотной осью 3-го порядка, а изоэнергетические линии имеют вид, представленный на рис. 1a. Второе отличие системы уравнений (5a), (5б) от обычных уравнений – присутствие во втором уравнении добавочной скорости, которая пропорциональна кривизне Берри (рис. 1b). Заметим, что кривизна Берри является знакопеременной.

Нам не удалось получить аналитическое решение системы (5a), (5б). Поэтому было проведено ее численное исследование. Подставляя $\dot{\mathbf{k}}$ из первого уравнения системы (3) во второе, а $\dot{\mathbf{r}}$ из второго уравнения – в первое, получим системы для определения k_x, k_y, x и y:

$$\begin{cases} \dot{x} = \dfrac{1}{\left[1 + \dfrac{\Omega_z(k_x, k_y)}{l_b^2}\right]} \dfrac{1}{\hbar} \dfrac{\partial E_m}{\partial k_x}, \\ \dot{y} = \dfrac{1}{\left[1 + \dfrac{\Omega_z(k_x, k_y)}{l_b^2}\right]} \dfrac{1}{\hbar} \dfrac{\partial E_m}{\partial k_y}, \end{cases} \tag{8a}$$

$$\begin{cases} \dot{k}_x = -\dfrac{1}{\left[1 + \dfrac{\Omega_z(k_x, k_y)}{l_b^2}\right]} \dfrac{1}{\hbar l_b^2} \dfrac{\partial E_m}{\partial k_y}, \\ \dot{k}_y = \dfrac{1}{\left[1 + \dfrac{\Omega_z(k_x, k_y)}{l_b^2}\right]} \dfrac{1}{\hbar l_b^2} \dfrac{\partial E_m}{\partial k_x}, \end{cases} \tag{8б}$$

где $l_b = \sqrt{\hbar c/eB}$ – магнитная длина. В процессе решения сначала необходимо найти траекторию в k-пространстве, а затем, используя полученные зависимости $k_x(t)$ и $k_y(t)$, определить траекторию в r-пространстве. При решении будем считать, что $\Delta = 0$.

Траектории в k- и r-пространствах для величины магнитного поля $B = 1$ МГс представлены на рис. 2a и b. Видно, что они имеют симметрию C_{3V}, причем, как и в обычном случае, траектории в k- и r-пространствах связаны поворотом на угол $\pi/2$ и изменением масштаба.

Сравнивая скорости, представленные на рис. 2c как с учетом, так и без учета кривизны Берри, видим, что кривизна Берри меняет симметрию поля скоростей с C_{6V} на C_{3V}. Можно заметить также, что в присутствии кривизны Берри и энергии $-\mathbf{m}\cdot\mathbf{B}$ наблюдаются не шесть, а три периода осцилляций скорости за один оборот.

Аналитически циклотронную частоту в присутствии кривизны Берри можно определить при малых k, когда эффектами искривления можно пренебречь, полагая в формуле (6) $\lambda = 0$. В результате имеем

$$\omega(k) = \frac{1}{1+\dfrac{\Omega_z(k)}{l_b^2}}\frac{1}{l_b^2}\frac{\nu}{k}. \tag{9}$$

Зависимости циклотронной частоты от k представлены на рис. 3. Как следует из рисунка и формулы

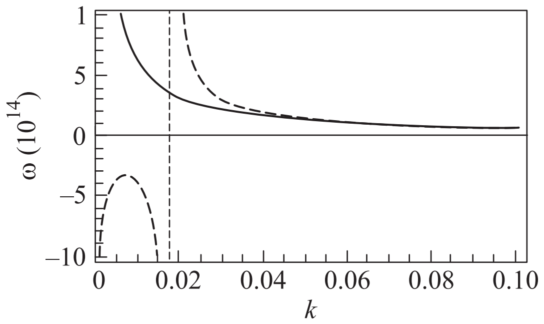

Рис. 3. Зависимость циклотронной частоты от k в присутствии кривизны Берри (штриховая линия) и без нее (сплошная линия), $\Delta = 0.03$ эВ

(9), вблизи некоторого k частота резко возрастает и меняет знак. Положение этой точки можно смещать, изменяя величину магнитного поля или ширину энергетической щели Δ. Видно, что при больших значениях k две кривые практически совпадают.

Таким образом, значения k делятся на две области, причем если при малых k вращение происходит в одном направлении, то при больших – в противоположном. Рассмотренные эффекты могут наблюдаться при изучении электронного циклотронного резонанса для поверхностных состояний в 3D топологических изоляторах.

Если энергетическая зона вырождена, однозонное приближение не является адекватным. В этом случае волновой пакет должен быть сконструирован из блоховских функций, относящихся к различным вырожденным зонам. Квазиклассические уравнения движения для такой ситуации были получены в работе [10]. Для того чтобы во время движения пакет не расщеплялся на несколько частей необходимо, чтобы в отсутствие внешних полей он был составлен из блоховских состояний, относящихся к зонам с одинаковыми энергиями. Уравнения движения в магнитном поле в подобной ситуации требуют отдельного рассмотрения.

Таким образом, в присутствии кривизны Берри и энергии орбитального магнитного момента в уравнениях движения волнового пакета изменяется симметрия электронных траекторий и появляются новые резонансные циклотронные частоты. Экспериментально подобные изменения в динамике можно будет обнаружить при наблюдении циклотронного резонанса поверхностных электронов в 3D топологических изоляторах. Несмотря на то, что прилагая сильное магнитное поле, мы разрушаем симметрию относительно инверсии времени, по результатам таких экспериментов можно будет судить о том, был ли данный изолятор тривиальным или нетривиальным в нулевом поле.

Авторы благодарны А.А. Перову и Д.В. Хомицкому за полезные обсуждения. Настоящая работа поддержана грантом РФФИ # 15-02-04028.

1. X. L. Qi and S.-C. Zhang, Rev. Mod. Phys. **83**, 1057 (2011).
2. D. Xiao, M.-C. Chang, and Q. Niu, Rev. Mod. Phys. **82**, 1959 (2010).
3. M.-C. Chang and Q. Niu, Phys. Rev. B **53**, 7010 (1996).
4. G. Sundaran and Q. Niu, Phys. Rev. B **59**, 14915, (1999).
5. J.N. Fuchs, F. Piechon, M.O. Goerbig, and G. Montambaux, Eur. Phys. J. B **77**, 351 (2010)
6. L. Fu, Phys. Rev. Lett. **103**, 266801 (2009).
7. Y. Chen, J.G. Analitis, J.-H. Chu, Z.K. Liu, S.-K. Mo, X.L. Qi, H.J. Zhang, D.H. Lu, X. Dai, Z. Fang, S.-C. Zhang, I.R. Fisher, Z. Hussain, and Z.-X. Shen, Science **325**, 178 (2009).
8. K. Kuroda, M. Arita, K. Miyamoto, M. Ye, J. Jiang, A. Kimura, E.E. Krasovskii, E.V. Chulkov, H. Iwasava, T. Okuda, K. Shimada, Y. Ueda, H. Namatame, and M. Taniguchi, Phys. Rev, Lett. **105**, 076802 (2010).
9. M. Nomura, S. Souma, A. Takayama, T. Sato, T. Takahashi, K. Eto, K. Segava, and Y. Ando, Phys. Rev. B **89**, 045134 (2014).
10. D. Culcer, Y. Yao, and Q. Niu, Phys. Rev. B **72**, 085110 (2005).