Письма в ЖЭТФ, том 104, вып. 12, с. 871 – 874

К вопросу о фазе Берри в квантовых осцилляциях в 3D топологических изоляторах

С. И. Веденеев[1)]

Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, 117924 Москва, Россия

Поступила в редакцию 25 октября 2016 г.

После переработки 11 ноября 2016 г.

Показано, что высококачественные монокристаллы Bi_2Se_3, легированные медью, с высокой объемной концентрацией носителей, вне всякого сомнения являются 3D-топологическими изоляторами. При изучении квантовых осцилляций ШдГ они показывают одновременно осцилляции двух видов, обусловленные как уровнями Ландау 3D-объемной поверхности Ферми, так и уровнями Ландау 2D-поверхности Ферми.

DOI: 10.7868/S0370274X16240097

В 1984 г. Берри [1] показал, что волновая функция адиабатически возмущенной квантовой системы при возвращении в свое первоначальное состояние может приобрести наряду с обычной динамической фазой и так называемую геометрическую квантовую фазу, известную впоследствии как фаза Берри. Позже Зак [2] привел доказательства, что результаты работы Берри применимы и к двигающемуся в кристалле электрону. Понятие фазы Берри в физике твердого тела связано с существованием непрерывного пространства параметров, в котором состояние системы может двигаться по замкнутому пути. Таким пространством параметров является зона Бриллюэна (ячейка обратной кристаллической решетки) с квазиимпульсом **p**, характеризующим энергию в зоне. В периодическом твердом теле **p** является сохраняющейся величиной, а волновая функция электрона определяется квазиимпульсом и зонным индексом n. Если возмущение изменяет квазиимпульс на замкнутом пути в зоне Бриллюэна, тогда волновая функция приобретает фазу Берри.

Топологическое нетривиальное состояние в 3D-топологическом изоляторе (ТИ) с сильным спин-орбитальным взаимодействием имеет щель изолятора в объеме и бесщелевое металлическое поверхностное состояние, состоящее из нечетного числа фермионов Дирака. Дираковские фермионы в 3D-ТИ характеризуются линейной зависимостью энергии от импульса, которая изображается в виде конусов Дирака с вершинами в точке Дирака. Теория [3] предсказывает, что при циркуляции электрона в импульсном пространстве вокруг дираковской точки его спин поворачивается на 2π и волновая функция электрона приобретает отличную от нуля фазу Берри. При линейной дисперсии в 3D-ТИ фаза Берри γ должна равняться π [1], тогда как металлы с обычным спин-орбитальным взаимодействием, например, такие как золото, имеют нулевую фазу Берри.

Поверхностные состояния в 3D-ТИ успешно были исследованы с помощью фотоэмиссионных спектроскопий с угловым разрешением по энергии и спину (ARPES и SRPES соответственно). Однако далеко не все материалы можно изучать в этих экспериментах, так как для них требуются образцы с очень чистой и плоской поверхностью. В этом случае могут оказаться полезными эксперименты с переносом заряда. Измерения квантовых осцилляций в сопротивлении – эффект Шубникова–де Гааза (ШдГ) могут подтвердить существование проводящих поверхностных состояний в 3D-ТИ.

Как известно [4], существует соответствие между полуклассической траекторией электрона в кристалле (в координатном пространстве) и орбитой в пространстве волновых векторов **k** (в зоне Бриллюэна). Во внешнем магнитном поле такая орбита является пересечением поверхности постоянной энергии с плоскостью постоянного вектора k_z, где z есть направление магнитного поля [5]. Электроны в кристалле во внешнем магнитном поле совершают циклотронное движение в плоскости, перпендикулярной магнитному полю, с квантованной энергией. Условие квантования выражается через полуклассическое соотношение [5]:

$$S = \frac{2\pi eB}{\hbar}(N + \delta), \tag{1}$$

где S – площадь поперечного сечения орбиты в **k** пространстве, перпендикулярного магнитному полю

[1)]e-mail: vedeneev@sci.lebedev.ru

и соответствующего уровню Ландау с индексом N, e – заряд электрона, а δ есть фазовая поправка Онзагера ($0 \leq \delta < 1$). Квантование Ландау, связанное с квазиклассическим циклотронным движением электронов в магнитном поле, может выявить разницу между обычными и дираковскими электронами. В обоих случаях плотность состояний становится периодической функцией обратной величины магнитного поля, что и приводит к осцилляциям ШдГ [6]. Но поскольку осцилляции, связанные с уровнями Ландау 2D-поверхности Ферми, должны зависеть только от перпендикулярной компоненты магнитного поля $B_\perp = B\cos(\theta)$, то, вращая образец в магнитном поле, можно отделить их от 3D-осцилляций, обусловленных объемными носителями (θ есть угол наклона между направлением магнитного поля $\mathbf{B}$ и осью $\mathbf{c}$, перпендикулярной к поверхности образца. Кроме того, фазовый множитель поверхностных 2D-осцилляций прямо отражает фазу Берри системы и тем самым позволяет подтвердить связь наблюдаемых осцилляции с дираковскими фермионами. В ТИ в магнитном поле проводимость осциллирует как

$$\Delta\sigma_{xx} \propto \cos[2\pi(\frac{F}{B_N} - \frac{1}{2} + \beta)], \qquad (2)$$

где F есть частота осцилляций, B_N – значение магнитного поля в экстремумах $\Delta\sigma_{xx}$, а параметр $\beta = \gamma/2\pi$. Для дираковских фермионов согласно теории $\beta = 1/2$ и фаза Берри $\gamma = \pi$ (см., например, [7]).

К сожалению, результаты топологического транспорта в 3D-ТИ пока остаются неоднозначными. Из-за того, что уровень Ферми в исследованных 3D-ТИ чаще всего расположен внутри объемной щели на краю зоны проводимости, последняя, связанная с объемными носителями, всегда доминирует над вкладом поверхностной проводимости [8–11]. Особенно это относится к определению фазы Берри из осцилляций ШдГ. Практически отсутствуют работы, где показано однозначно, что фаза Берри $\gamma = \pi$. Ранее в работе [12] отмечалось, что при определении фазы Берри из осцилляций ШдГ величины B_N следует связывать с минимумами магнитопроводимости σ_{xx} или σ_{xy}. Важность определения индекса N при фазовом анализе осцилляций ШдГ видна из работы Ren и др. [13], в которой исследовался 3D-ТИ Bi_2Te_2Se. В оригинальной работе авторы определяли индексы N по минимумам в сопротивлении ρ_{xx} и получили значение фазового параметра $\beta = 0.22 \pm 0.12$ [см. выражение (2)]. Впоследствии эти результаты были обработаны заново [14], где индексы N отождествлялись уже с минимумами проводимости σ_{xx}. Из тех же экспериментальных данных были получены $\beta = 0.5$ и $\gamma = \pi$, как и следует из теории для осцилляций ШдГ, связанных с фермионами Дирака. Поскольку в 3D-ТИ 2D- и 3D-проводимости аддитивны, то можно измеренные сопротивления преобразовать в проводимости, в частности, $\sigma_{xy} = -\rho_{xy}/(\rho_{xx}^2 + \rho_{xy}^2)$.

Ранее в работе [12] было предположено, что 3D-монокристаллы Bi_2Se_3, легированные медью, с высокой объемной концентрацией носителей $n \simeq 10^{19}$–10^{20} см$^{-3}$ являются 3D-ТИ с множеством параллельных 2D-проводящих каналов. Представляло интерес измерить продольное ρ_{xx} и холловское ρ_{xy} сопротивления образца, в котором одновременно наблюдались бы 2D- и 3D-осцилляции ШдГ, и определить для них фазы Берри.

Из-за простой зонной структуры и относительно большой энергетической щели среди 3D-ТИ наиболее хорошо изучены материалы на основе халькогенидов висмута Bi_2Se_3 и Bi_2Te_3. Особенно это относится к соединению Bi_2Se_3. Благодаря слоистости, его кристаллы легко расслаиваются и для исследований нетрудно получить монокристаллы необходимых размеров с зеркальной поверхностью. В настоящей работе использовали результаты измерений осцилляций ШдГ в продольном ρ_{xx} и холловском ρ_{xy} сопротивлениях образца $Bi_{2-x}Cu_xSe_3$ с концентрацией носителей $n_{3D} = 2.8 \cdot 10^{19}$ см$^{-3}$ и размером $10 \times 5 \times 0.2$ мм. Метод выращивания аналогичных монокристаллов и их характеристики описаны в работе [12].

На рис. 1a приведены осцилляции холловской проводимости $\Delta\sigma_{xy}$ монокристалла $Bi_{2-x}Cu_xSe_3$ как функции обратной величины магнитного поля. При построении этих кривых использовались зависимости сопротивлений ρ_{xx} и ρ_{xy} от магнитного поля, измеренные в полях до 14 Тл при указанных углах наклона θ между направлением магнитного поля и осью c образца (схематически показано на вставке рис. 1a) при температуре 1.5 К. Для ясности кривые смещены вниз относительно кривой для $\theta = 0°$. На кривых хорошо видны осцилляции с большим периодом, на которые при высоких полях налагаются осцилляции с малым периодом (левая часть рисунка). Видно, что амплитуда высокочастотных осцилляций уменьшается с увеличением угла θ и при $\theta \approx 37.5°$ они исчезают. Амплитуда осцилляций с большим периодом в области указанных углов θ практически не изменяется. Фурье-анализ осцилляций при $\theta = 0°$ показал наличие двух частот $F_1 = 287$ Тл и $F_2 = 35$ Тл, соответствующих двум вкладам в магнитопроводимость образца.

На рис. 1b приведены те же осцилляции $\Delta\sigma_{xy}$ что и на рис. 1a, на которых в результате сглажи-

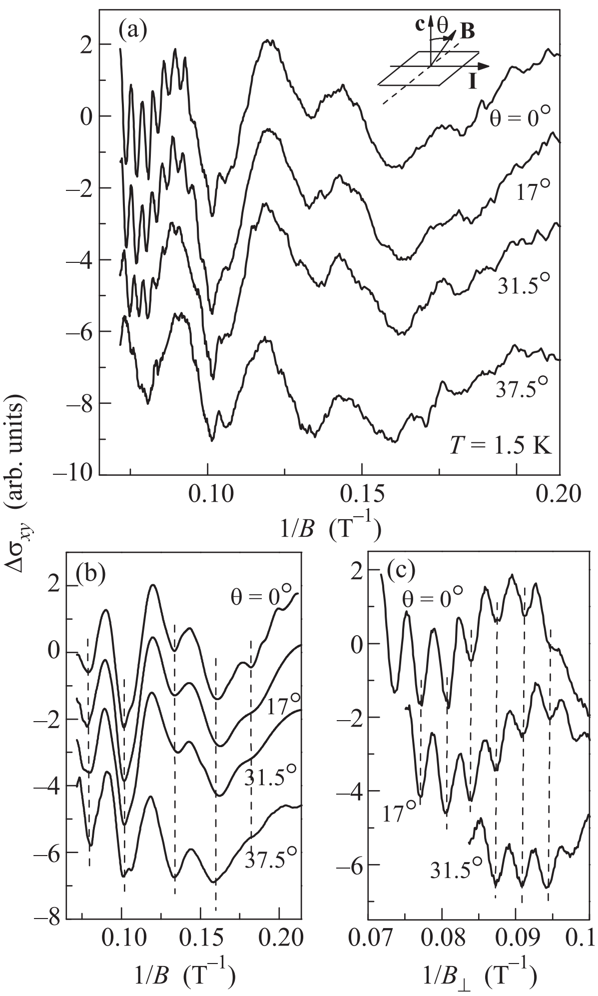

Рис. 1. (a) – Осцилляции холловской проводимости $\Delta\sigma_{xy}$ монокристалла $Bi_{2-x}Cu_xSe_3$ как функции обратной величины магнитного поля. При построении этих кривых использовались зависимости сопротивлений ρ_{xx} и ρ_{xy} от магнитного поля, измеренные в полях до 14 Тл при указанных углах наклона θ между направлением магнитного поля и осью c образца (схематически показано на вставке) при температуре 1.5 K. Для ясности кривые смещены вниз относительно кривой для $\theta = 0°$. (b) – Те же осцилляции $\Delta\sigma_{xy}$, что и на (a), на которых в результате сглаживания сохранились лишь осцилляции с большим периодом. (c) – Части кривых $\Delta\sigma_{xy}$ из (a) с высокочастотными осцилляциями в зависимости от обратной величины перпендикулярной составляющей магнитного поля $1/B_\perp = 1/B\cos\theta$. Пунктирными линиями на (b), (c) отмечено положение минимумов

вания сохранились лишь осцилляции с большим периодом. Положение минимумов на этих кривых в зависимости от обратного магнитного поля не меняется с изменением угла θ, т.е. не меняется и частота F_2. Такое поведение осцилляций ШдГ указывает на их обусловленность квантованием Ландау 3D-

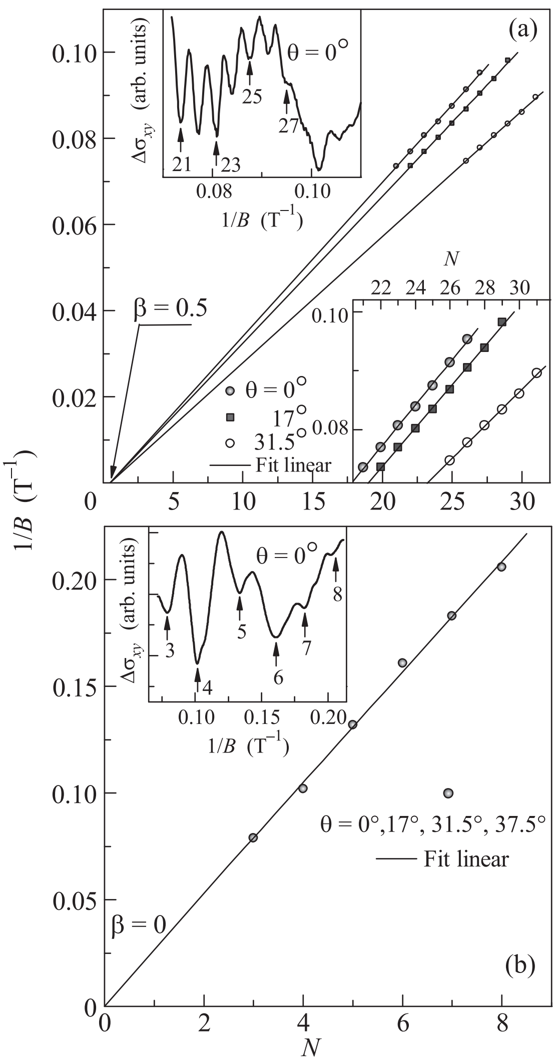

Рис. 2. (a) – Положение минимумов высокочастотных осцилляций $\Delta\sigma_{xy}$ в обратном магнитном поле $1/B$ в зависимости от номера уровня Ландау N (веерная диаграмма) для трех углов наклона θ образца относительно направления магнитного поля. На верхней вставке, где приведена кривая $\Delta\sigma_{xy}$ для $\theta = 0$ из рис. 1c, стрелками отмечены индексы N. Область экспериментальных точек и прохождение через них линий, полученных в результате линейных аппроксимаций данных, показана на нижней вставке в увеличенном масштабе. Данные для всех углов хорошо ложатся на прямые линии, которые пересекают горизонтальную ось N в точке 0.5. (b) – Веерная диаграмма уровней Ландау для сглаженных низкочастотных осцилляций $\Delta\sigma_{xy}$ из рис. 1b. Точки относятся ко всем углам, указанным на рисунке. Зависимость $\Delta\sigma_{xy}$ от $1/B$ для $\theta = 0$ с соответствующими индексами N показана на вставке (отмечены стрелками). Линейная экстраполяция данных к горизонтальной оси N дает значение фазового параметра $\beta = 0$ и фаза Берри для этих 3D-осцилляций равна нулю

объемной поверхности Ферми. Постоянство частоты осцилляций соответствует малой анизотропии 3D-поверхности Ферми в плоскости изменения угла θ.

На рис. 1c приведены части кривых $\Delta\sigma_{xy}$ из рис. 1a с высокочастотными осцилляциями, но уже в зависимости от обратной величины перпендикулярной составляющей магнитного поля $1/B_\perp = 1/B\cos\theta$. 2D-характер высокочастотных осцилляций очевиден, так как положение минимумов на кривых определяется перпендикулярной компонентой магнитного поля $B_\perp$ и оно не меняется с изменением угла θ. Таким образом, осцилляции с частотой F_1 связаны с уровнями Ландау 2D-поверхности Ферми в 3D-ТИ.

После того как показано, что в исследованном образце одновременно наблюдаются осцилляции ШдГ, обусловленные 2D- и 3D-поврхностями Ферми, можно перейти к определению соответствующих фаз Берри.

На рис. 2a изображено положение минимумов высокочастотных осцилляций $\Delta\sigma_{xy}$ в обратном магнитном поле $1/B$ в зависимости от номера уровня Ландау N (веерная диаграмма) для трех углов наклона θ образца относительно направления магнитного поля. На верхней вставке, где показана кривая $\Delta\sigma_{xy}$ для $\theta = 0°$ из рис. 1c, стрелками отмечены индексы N. Следует подчеркнуть, что погрешность определения величины $1/B_N$ для минимумов на кривой, приведенной на вставке к рис. 2a, не превышает $5 \cdot 10^{-5}$, что значительно меньше размера точек на основном рисунке. Область экспериментальных точек и прохождение через них линий, полученных в результате линейных аппроксимаций данных, показана на нижней вставке в увеличенном масштабе. Дальнейшая экстраполяция значений $1/B_N \to 0$ дает, согласно выражению (2), фазовый параметр $\beta = \gamma/2\pi = 0.5$, т.е. фаза Берри $\gamma = \pi$ и не зависит от направления магнитного поля при указанных углах θ.

На рис. 2b приведена веерная диаграмма уровней Ландау для сглаженных низкочастотных осцилляций $\Delta\sigma_{xy}$ из рис. 1b. Так как с изменением угла θ положение минимумов этих осцилляций в зависимости от обратного магнитного поля не меняется, то точки относятся ко всем четырем углам, указанным на рисунке. Зависимость $\Delta\sigma_{xy}$ от $1/B$ для $\theta = 0°$ с соответствующими индексами N представлена на вставке (отмечены стрелками). Линейная экстраполяция данных к горизонтальной оси N дает значение фазового параметра $\beta = 0$ и, следовательно, фаза Берри для низкочастотных осцилляций $\Delta\sigma_{xy}$ также равна нулю.

Таким образом, показано, что высококачественные монокристаллы $Bi_{2-x}Cu_xSe_3$ являются 3D-ТИ. При изучении квантовых осцилляций ШдГ они показывают осцилляции двух видов, которые обусловлены как уровнями Ландау 3D-объемной поверхности Ферми, так и уровнями Ландау 2D-поверхности Ферми.

1. M. V. Berry, Proc. R. Soc. London A **392**, 45 (1984).
2. J. Zak, Phys. Rev. Lett. **62**, 2747 (1989).
3. J. C. Y. Teo, L. Fu, and C. L. Kane, Phys. Rev. B **78**, 045426 (2008).
4. J. M. Ziman, *Principles of the Theory of Solids*, University Press, Cambridge, England (1972).
5. G. P. Mikitik and Y. V. Sharlai, Phys. Rev. Lett. **82**, 2147 (1999).
6. D. Shoenberg, *Magnetic Oscillations in Metals*, Cambridge University Press, Cambridge (1984); Д. Шенберг, *Магнитные осцилляции в металлах*, Мир, М. (1986).
7. Y. Zhang, Y-W. Tan, L. Stormer, and P. Kim, Nature **438**, 201 (2005).
8. D-X. Qu, Y. S. Hor, J. Xiong, R. J. Cava, and N. P. Ong, Science **329**, 821 (2010).
9. J. G. Analytis, R. D. McDonald, S. C. Riggs, J.-H. Chu, G. S. Boebinger, and I. R. Fisher, Nature Phys. **6**, 960 (2010).
10. K. Eto, Z. Ren, A. A. Taskin, K. Segawa, and Y. Ando, Phys. Rev. B **81**, 195309 (2010).
11. H. Cao, S. Xu, I. Miotkowski, J. Tian, D. Pandey, M. Z. Hasan, and Y. P. Chen, Phys. Stat. Sol. RRL **7**, 133 (2013).
12. С. И. Веденеев, Д. А. Князев, В. А. Прудкогляд, Т. А. Романова, А. В. Садаков, ЖЭТФ **148**(1), 75 (2015).
13. Z. A. Ren, A. A. Taskin, S. Sasaki, K. Segawa, and Y. Ando, Phys. Rev. B **82**, 241306(R) (2010).
14. Y. Ando, J. of the Phys. Soc. of Jap. **82**, 102001 (2013).