Письма в ЖЭТФ, том 109, вып. 5, с. 337 – 339

Рассеяние электронов между краевыми и двумерными состояниями двумерного топологического изолятора и проводимость полосы топологического изолятора в металлическом состоянии

М. М. Махмудиан[+*1)], *М. В. Энтин*[+*1)]

[+]*Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова Сибирского отделениия РАН, 630090 Новосибирск, Россия*

[*]*Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия*

Поступила в редакцию 27 декабря 2018 г.
После переработки 27 декабря 2018 г.
Принята к публикации 28 декабря 2018 г.

Найдено время жизни электронов на краевых состояниях двумерного топологического изолятора, попадающих на фон разрешенной двумерной зоны. Показано, что при рассеянии на кулоновских примесях это время может значительно превышать время свободного пробега двумерных электронов. В результате, проводимость полосы металлического двумерного топологического изолятора может, в основном, определяться краевыми состояниями.

DOI: 10.1134/S0370274X19050114

Введение. Краевые состояния топологического изолятора (ТИ) являются ярким проявлением его топологических свойств. Эти состояния покрывают всю запрещенную зону ТИ. Из-за топологической защищенности в них оказывается запрещенным обратное рассеяние носителей заряда. Как следствие, кондактанс ТИ в изолирующем состоянии оказывается баллистическим и нелокальным. В работе [1] мы показали, что в ряде моделей эти состояния обладают линейной дисперсией и простираются за пределы запрещенной зоны. В настоящей статье изучается примесное рассеяние носителей между краевыми состояниями на фоне разрешенной зоны и двумерными состояниями. Мы покажем, что хотя такие переходы топологически не запрещены, вероятность кулоновского рассеяния оказывается малой, что приводит к аномально большой длине пробега носителей на краевых состояниях. В результате, проводимость имеет значительную добавку от таких краевых состояний, а кондактанс длинной полосы с уровнем Ферми в разрешенной двумерной зоне может даже определяться не двумерными, а краевыми носителями.

Краевые и двумерные состояния полуограниченного ТИ. Расчет краевых и двумерных состояний ТИ мы будем проводить на основе гамильтониана Волкова–Панкратова [2], адаптированного для двумерной системы [1]. Этот гамильтониан непосредственно применим к двумерному изолятору на основе слоя HgTe переменной толщины. Толстая часть имеет отрицательный знак щели и соответствует ТИ, тонкая имеет положительную энергетическую щель и соответствует обычному изолятору:

$$H = \begin{pmatrix} \Delta(y)\sigma_0 & v\boldsymbol{\sigma}\mathbf{k} \\ v\boldsymbol{\sigma}\mathbf{k} & -\Delta(y)\sigma_0 \end{pmatrix}, \qquad (1)$$

где $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ – оператор двумерного импульса, σ_0 – единичная матрица 2×2, $\boldsymbol{\sigma}$ – матрицы Паули. В дальнейшем, за исключением окончательных выражений, мы считаем $\hbar = 1$.

Далее мы будем рассматривать ступенчатую зависимость щели $\Delta(y) = \Delta_1\theta(-y) + \Delta_2\theta(y)$, $\Delta_1 > 0$, $\Delta_2 < 0$, так что полуплоскость $y < 0$ является обычным изолятором, а полуплоскость $y > 0$ – ТИ.

Гамильтониан (1) с постоянной щелью $\Delta_{1,2}$ имеет собственные функции

$$\Psi^{(1,2)}_{\mathbf{k},\sigma} = \zeta^{(1,2)}_{\mathbf{k},\sigma} e^{ik_x x + ik_y y}, \qquad (2)$$

$$\zeta^{(1,2)}_{\mathbf{k},+1} = (1, 0, 0, \alpha^{(1,2)}_{\mathbf{k},+1}), \qquad (3)$$

$$\zeta^{(1,2)}_{\mathbf{k},-1} = (0, 1, \alpha^{(1,2)}_{\mathbf{k},-1}, 0), \qquad (4)$$

$$\alpha^{(1,2)}_{\mathbf{k},\sigma} = \frac{v(k_x + i\sigma k_y^{(1,2)})}{E + \Delta_{1,2}} \qquad (5)$$

с энергиями

$$E = \mu\sqrt{\Delta^2_{1,2} + v^2 k^2}. \qquad (6)$$

Здесь спиновый индекс $\sigma = \pm 1$, индекс $\mu = \pm 1$ соответствует положительным и отрицательным энер-

[1)]e-mail: mahmood@isp.nsc.ru; entin@isp.nsc.ru гиям; для действительных $\mathbf{k}$ энергии попадают, соответственно, в зону проводимости и валентную зону. Собственные функции гамильтониана (1), локализованные вблизи $y = 0$, состоят из затухающих волн с $k_y^{(1,2)} = -i\lambda_{1,2}$, $\lambda_1 > 0$ и $\lambda_2 < 0$ для $y < 0$ и $y > 0$ соответственно. Используя (6), находим $\lambda_{1,2}^2 = (\Delta_{1,2}^2 - E^2)/v^2 + k_x^2$.

Из условия непрерывности $\Psi^{(1)}_{\mathbf{k},\sigma}|_{y=0} = \Psi^{(2)}_{\mathbf{k},\sigma}|_{y=0}$, найдем энергии краевых состояний $E = \epsilon_{k_x,\sigma} \equiv \sigma v k_x$, параметры $\lambda_{1,2} = \Delta_{1,2}/v$ и локализованные краевые собственные функции

$$\psi_{k_x,\sigma} = \frac{C\chi_{k_x,\sigma}}{\sqrt{L_x}} e^{ik_x x} \times \begin{cases} e^{\frac{\Delta_1}{v}y}, & \text{при} \quad y < 0, \\ e^{\frac{\Delta_2}{v}y}, & \text{при} \quad y > 0, \end{cases} \tag{7}$$

$$\chi_{k_x,+1} = (1,0,0,1),$$
$$\chi_{k_x,-1} = (0,1,-1,0),$$
$$C = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\Delta_1|\Delta_2|}{v\,(\Delta_1 + |\Delta_2|)}}.$$

Здесь и далее L_x и L_y – размеры образца по x и y соответственно. Электроны на локализованных состояниях имеют скорости σv. В области энергий $|E| < |\Delta_2|$ эти локализованные решения являются единственными. Однако, они существуют для всех энергий (см. рис. 1).

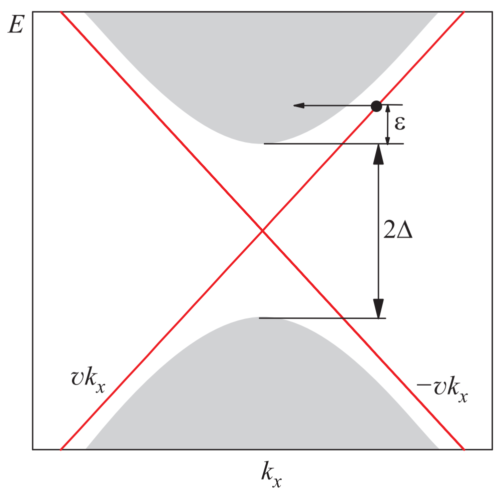

Рис. 1. (Цветной онлайн) Энергетическая диаграмма двумерного топологического изолятора с $\Delta_1 = -\Delta_2 = \Delta$. Краевые состояния перекрываются по энергии с двумерными. Примесное рассеяние происходит между краевыми и двумерными состояниями. При переходах вблизи дна двумерной зоны импульс в краевом состоянии значительно меньше импульса в двумерном состоянии

При $E > \Delta_1$ ($\Delta_1 > |\Delta_2|$) существуют делокализованные по y решения. Их можно нумеровать непрерывным волновым вектором $k_y > 0$:

$$\Psi_{\mathbf{k},\sigma} = \frac{e^{ik_x x}}{\sqrt{L_x}} \times \tag{8}$$
$$\times \begin{cases} C^{(1+)}_{\mathbf{k},\sigma}\zeta^{(1)}_{\mathbf{k},\sigma}e^{ik_y y} + C^{(1-)}_{\mathbf{k},\sigma}\zeta^{(1)}_{\mathbf{k},-\sigma}e^{-ik_y y}, & \text{при} \quad y < 0, \\ C^{(2+)}_{\mathbf{k},\sigma}\zeta^{(2)}_{\mathbf{k},\sigma}e^{ik_y y} + C^{(2-)}_{\mathbf{k},\sigma}\zeta^{(2)}_{\mathbf{k},-\sigma}e^{-ik_y y}, & \text{при} \quad y > 0. \end{cases}$$

Пусть со стороны обычного изолятора (ОИ) ($y < 0$) имеются падающая и отраженная волны, а со стороны ТИ ($y > 0$), соответственно, только прошедшая волна:

$$\Psi_{\mathbf{k},\sigma} = \frac{e^{ik_x x}}{\sqrt{L_x}} \times \tag{9}$$
$$\times \begin{cases} C^{(1+)}_{\mathbf{k},\sigma}\zeta^{(1)}_{\mathbf{k},\sigma}e^{ik_y y} + C^{(1-)}_{\mathbf{k},\sigma}\zeta^{(1)}_{\mathbf{k},-\sigma}e^{-ik_y y}, & \text{при} \quad y < 0, \\ C^{(2+)}_{\mathbf{k},\sigma}\zeta^{(2)}_{\mathbf{k},\sigma}e^{ik_y y}, & \text{при} \quad y > 0. \end{cases}$$

Из непрерывности волновой функции на границе раздела следует, что

$$C^{(1\pm)}_{\mathbf{k},\sigma} = b^{(\pm)}_{\mathbf{k},\sigma}C^{(2)}_{\mathbf{k},\sigma}, \tag{10}$$

$$b^{(\pm)}_{\mathbf{k},\sigma} = \mp\frac{\alpha^{(2)}_{\mathbf{k},\sigma} - \alpha^{(1)*}_{\mathbf{k},\sigma}}{\alpha^{(1)}_{\mathbf{k},\sigma} - \alpha^{(1)*}_{\mathbf{k},\sigma}}, \tag{11}$$

где $\alpha^{(1,2)}_{\mathbf{k},\sigma}$ определяется с помощью (5) с $E = \mu\varepsilon_k \equiv \mu\sqrt{\Delta_2^2 + v^2k^2}$.

Нормировка волновой функции (9) дает

$$C^{(2)}_{\mathbf{k},\sigma} = \left[\frac{L_y}{2}\left(\left|b^{(+)}_{\mathbf{k},\sigma}\right|^2 + \left|b^{(-)}_{\mathbf{k},\sigma}\right|^2\right)\left(1 + \left|\alpha^{(1)}_{\mathbf{k},\sigma}\right|^2\right) + \right.$$
$$\left. + \left(1 + \left|\alpha^{(2)}_{\mathbf{k},\sigma}\right|^2\right)\right]^{-1/2}. \tag{12}$$

Время жизни на краевых состояниях двумерного ТИ. При заданном спине электроны на краевом состоянии движутся в одну сторону. Единственный возможный механизм рассеяния между краевыми состояниями – это обратное рассеяние. Но из-за сохранения спина и оно запрещено в отсутствие нарушения симметрии по отношению к обращению времени. Однако, краевые состояния не изолированы относительно двумерных состояний в присутствие упругого рассеяния. Под действием потенциала примесей электроны могут переходить из краевых состояний в двумерные и обратно. Рассмотрим время жизни электрона τ на краевом состоянии. Вероятность рассеяния из краевого состояния в двумерное в борновском приближении имеет вид

$$W_{k_x,\sigma;\mu,\mathbf{k}',\sigma} = \frac{2\pi}{\hbar^2}\sum_i \int \left|V_{k_x,\sigma;\mu,\mathbf{k}',\sigma}\right|^2 \delta(vk_x - \mu\varepsilon_{\mathbf{k}'}). \tag{13}$$

Здесь $V(\mathbf{q}) = 2\pi e^2/\kappa q$ – двумерный Фурье-образ потенциала неэкранированной заряженной примеси, e – заряд электрона, κ – диэлектрическая проницаемость среды (экранировкой мы пренебрегаем). Суммирование идет по номерам примесей i.

Матричный элемент примесного потенциала имеет вид

$$V_{k_x,\sigma;\mu,\mathbf{k}',\sigma} = \int \psi^*_{k_x,\sigma} V(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i)\Psi_{\mathbf{k}',\sigma} d\mathbf{r}, \qquad (14)$$

где $V(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{q} V(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{qr}}/(2\pi)^2$. С учетом (7) и (9)

$$V_{k_x,\sigma;\mu,\mathbf{k}',\sigma} = CC^{(2)}_{\mathbf{k},\sigma}\frac{e^2}{\kappa q L_x}\delta\left(q_x + k'_x - k_x\right) \times$$
$$e^{-iq_y y_i}\left[\frac{b^{(+)}_{\mathbf{k},\sigma}\left(1+\alpha^{(1)}_{\mathbf{k},\sigma}\right)}{\frac{\Delta_1}{v} + i\left(q_y + k'_y\right)} + \frac{b^{(-)}_{\mathbf{k},\sigma}\left(1+\alpha^{(1)*}_{\mathbf{k},\sigma}\right)}{\frac{\Delta_1}{v} + i\left(q_y - k'_y\right)} - \right. \qquad (15)$$
$$\left. - \frac{1+\alpha^{(2)}_{\mathbf{k},\sigma}}{\frac{\Delta_2}{v} + i\left(q_y + k'_y\right)}\right].$$

Мы будем проводить вычисление матричного элемента, считая, что $\Delta_1 = -\Delta_2 = \Delta$, а также, что энергия электрона находится вблизи дна двумерной зоны, $E - \Delta \equiv \epsilon \ll \Delta$. Соответствующий передаваемый импульс $q \gg k$. Это дает возможность сильно упростить ответ. Тогда с учетом (15) вероятность рассеяния примет вид

$$W_{k_x,\sigma;\mu,\mathbf{k}',\sigma} = \frac{3\pi n_i}{\kappa^2}\left(\frac{ev}{2\Delta}\right)^4 k'^2_y \delta(vk_x - \mu\varepsilon_{\mathbf{k}'}), \qquad (16)$$

где n_i – концентрация примесей. Интегрируя по импульсу $\mathbf{k}'$, находим обратное время жизни электрона на краевом состоянии

$$\frac{1}{\tau_{ed}} = \frac{3\pi^2 n_i e^4 \epsilon}{8\kappa^2\Delta^2}. \qquad (17)$$

Обратное транспортное время рассеяния двумерных электронов на заряженных примесях равно $1/\tau_2 = \pi^2 e^4 n_i/\kappa^2\epsilon_F$, где ϵ_F – энергия Ферми, отсчитанная от Δ. По сравнению с $1/\tau_2$ полученная вероятность рассеяния краевых электронов в двумерные состояния содержит малый параметр $\tau_2/\tau_{ed} = (3/8)(\epsilon_F/\Delta)^2$. Частично подавление рассеяния из краевых состояний в двумерные по сравнению с кулоновским рассеянием двумерных электронов происходит из-за большого поперечного импульса краевых состояний (и соответствующей поперечной части энергии), что уменьшает кулоновское взаимодействие. Дополнительным фактором подавления $\sim\epsilon_F/\Delta$ выступает малость волновой функции двумерных электронов вблизи перехода $y = 0$, обусловленная тем, что для низкоэнергетических двумерных электронов (при $E \to \Delta$) с ненулевым k_x скачок щели выступает в роли бесконечного барьера (если $k_x = 0$, то барьер, наоборот, безотражательный, но это справедливо только в одной точке $k_x = 0$) .

При $\epsilon_F = 1$ мэВ, $\Delta = 7.5$ мэВ, соответствующей толщинам слоев 5.6 и 7 нм [3], этот параметр равен 0.0067. Как следствие, краевые электроны могут иметь значительные длины пробега. Собственно, это и определяет их потенциально большой вклад в проводимость среды, несмотря на малую занимаемую ими площадь.

Кондактанс полосы ТИ. Высокая величина одномерной проводимости по краевому состоянию может привести к тому, что даже в металлическом состоянии кондактанс образца будет определяться не его внутренностью, а краем. Рассмотрим для этого полосу ТИ с размерами $L_x \gg L_y \gg v/\Delta$ с вырожденным электронным газом. В такой полосе кондактанс внутренней области можно оценить как $\Sigma_2 = (e^2/2\pi\hbar)k_F l_2 L_y/L_x$. В то же время кондактанс краевого состояния есть $\Sigma_1 = 4(e^2/2\pi\hbar)l_1/L_x$. Сравнение двух величин показывает, что $\Sigma_1/\Sigma_2 = 4l_1/(l_2 k_F L_y)$, что дает $\Sigma_1 > \Sigma_2$ при $L_y k_F < 4l_1/l_2$.

Обсуждение. Результаты были получены в модели Волкова–Панкратова [2]. Это обстоятельство несущественно, так как причиной малости вероятности рассеяния является большой характерный импульс краевых состояний, по сравнению с двумерными электронами – параметр, который нечувствителен к модели. Отметим, что в системе с толщиной, близкой к критической 6.3 нм, развитые флуктуации толщины покрывают весь образец, создавая развитую сеть внутренних краевых состояний. Это может сделать краевой вклад определяющим.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант # 17-02-00837).

1. M. V. Entin, M. M. Mahmoodian, and L. I. Magarill, EPL **118**, 57002 (2017).
2. B. A. Volkov and O. A. Pankratov, JETP Lett. **42**, 178 (1985).
3. X.-L. Qi and Sh.-Ch. Zhang, Rev. Mod. Phys. **83**, 1057 (2011).