

УДК 530.145

ВИХРЕВЫЕ СОСТОЯНИЯ С ЛИНЕЙНЫМ ЭЛЕКТРОННЫМ СПЕКТРОМ В СТРУКТУРАХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ IV-VI

В. С. Виноградов

Теоретически установлено, что в плоских однородных структурах двузонных полупроводников при любом знаке щелевого параметра могут существовать спин-поляризованные вихревые состояния с линейным электронным спектром. Эти состояния привязаны к поверхности цилиндра микроскопического радиуса, имеют полный момент количества движения $1/2$ и стабилизируются при приложении к обеим сторонам плоскости образца электрического напряжения.

Ключевые слова: топологические изоляторы, дираковский спектр, поверхностные и краевые состояния, вихревые состояния.

В настоящее время проявляется большой интерес к топологическим изоляторам (ТИ). Результаты части исследований обобщены в обзорах [1–3]. Основными свойствами ТИ является наличие в их спектре спин-поляризованных линейных по импульсу токовых состояний. При определенных условиях такие состояния возникают на поверхности раздела двух полупроводников – поверхностные состояния (ПС), или на линии пересечения (ребре) двух плоскостей – краевые состояния (КС). ПС наблюдались методом электронной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) в сплаве $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ и родственных соединениях [1, 4], в полупроводнике $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Se}$, принадлежащем к разновидности “кристаллических” ТИ [5, 6]. КС наблюдались в гетероструктуре $\text{CdTe}/\text{HgTe}/\text{CdTe}$ [3, 7]. Хотя КС – тонкая одномерная проводящая нить – подразумевает высокую симметрию состояния, структура, использованная в эксперименте [3, 7], была в высокой степени несимметричной.

В настоящей работе была поставлена цель найти состояния со свойствами КС высокой симметрии. Оказалось, что такие состояния возможны и на плоскости раздела между двузонным полупроводником и вакуумом. Они представляют собой вихревые состояния (ВС). Если плоскость однородна, то вихри возникают в любой ее точке.

ФИАН, 119991 Россия, Москва, Ленинский пр-т, 53; e-mail: vin-ir@yandex.ru.

При решении поставленных задач будет предполагаться, что свойства объема полупроводника меняются плавно, и при выводе необходимых уравнений может применяться kp -метод.

Уравнения для двухзонного полупроводника типа РbТе в kp -приближении имеют вид

$$\hat{M}\psi \equiv \begin{pmatrix} \Delta - \varepsilon & \vec{\sigma}\vec{P} \\ \vec{\sigma}\vec{P} & -\Delta - \varepsilon \end{pmatrix} \psi = 0. \quad (1)$$

Подробный вывод уравнений приведён в [8–9]. В (1) $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ – вектор спина, $\vec{P} = (\nu_\perp \hat{p}_x, \nu_\perp \hat{p}_y, \nu_\parallel \hat{p}_z)$, $\hat{p} = -i\hbar\nabla$, ε – собственное значение энергии, Δ – параметр щели. Константы ν_\perp, ν_\parallel описывают анизотропию спектра долины. Сначала мы будем отвлекаться от эффектов многодолинности.

Для описания волновой функции ВС будем использовать локальную систему координат ρ, φ, z с центром в сердцевине вихря. Ось z перпендикулярна плоскости раздела и направлена в вакуум. Решение уравнений (1) будем искать в виде

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_{\mu\lambda} C_{\mu\lambda}(\rho, \varphi) \psi_{\mu\lambda}(\varphi) \exp(ik_z z) \quad (\mu = \pm 1; \lambda = \pm 1). \quad (2)$$

Ортогональные и нормированные функции $\psi_{\mu\lambda}$ представляются в виде

$$\psi_{\mu\lambda}(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \psi(\lambda) \\ \mu\psi(-\lambda) \end{pmatrix}, \quad (3)$$

$$\psi_\lambda(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -i\lambda \exp(-i\varphi/2) \\ \exp(i\varphi/2) \end{pmatrix} \quad (\mu, \lambda = \pm 1). \quad (4)$$

Функции $\psi(\lambda)$ являются собственными функциями оператора спиральности:

$$\hat{s}\psi(\lambda) = \lambda\psi(\lambda) (\lambda = \pm 1), \quad \hat{s} = ([\vec{e}\hat{p}]\vec{\sigma})/p_\perp,$$

\vec{e} – единичный вектор || оси z , $\vec{p}_\perp = \hbar(k_x, k_y, 0) = \hbar k_\perp (\cos \varphi, \sin \varphi, 0)$ – поперечная часть импульса. Оператор \hat{s} с точностью до размерного множителя совпадает с оператором спин-орбитального взаимодействия $-U_{SO}^{\text{surf}}$, возникающего из-за деления пространства на полупространство, где спин-орбитальное взаимодействие отлично от нуля (полупроводник) и полупространство, где оно равно нулю (вакуум). Вектор \vec{e} указывает ориентацию плоскости раздела, вектор $[\vec{e}\hat{p}]$ параллелен вектору орбитального момента \vec{M}_o , а все выражение $\hat{s} \sim U_{SO}^{\text{surf}} \sim (\vec{\sigma}\vec{M}_o)$. Размерный коэффициент оказывается равным Δ , см. уравнение (9).

Подставим выражение (2) в уравнение (1). Умножим получившееся выражение слева на $\psi_{\mu'\lambda'}^+$. Разделив результат на $\exp(ik_z z)$, получим соотношение вида

$$\sum_{\mu\lambda} \langle \mu'\lambda' | \hat{M} | \mu\lambda \rangle C_{\mu\lambda}(\rho, \varphi) = 0. \quad (5)$$

В результате получим уравнение для орбитальной части волновой функции $C(\rho, \varphi)$

$$(H + S)C(\rho, \varphi) = 0, \quad (6)$$

где введены обозначения

$$H = \begin{pmatrix} H(\lambda) & 0 \\ 0 & H(-\lambda) \end{pmatrix}, \quad S = \begin{pmatrix} 0 & S(\lambda) \\ S(\lambda) & 0 \end{pmatrix},$$

$$C(\rho, \varphi) = \begin{pmatrix} C_{\lambda}(\rho, \varphi) \\ C_{-\lambda}(\rho, \varphi) \end{pmatrix}, \quad (\lambda = \pm 1), \quad (7)$$

$$H(\lambda) = \begin{pmatrix} a_{-}(\lambda) & b_{-}(\lambda) \\ b_{+}(\lambda) & a_{+}(\lambda) \end{pmatrix},$$

$$S(\lambda) = i\lambda(\hbar\nu_{\perp}/\rho) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} (\partial/\partial\varphi), \quad C_{\lambda}(\rho, \varphi) = \begin{pmatrix} C_{1\lambda}(\rho, \varphi) \\ C_{-1\lambda}(\rho, \varphi) \end{pmatrix},$$

$$a_{\pm}(\lambda) = -\varepsilon \pm \hbar\nu_{\parallel}\kappa_z, \quad b_{\pm}(\lambda) = \Delta \pm \lambda\hbar\nu_{\perp}(\partial/\partial\rho + 1/2\rho).$$

Оператор S в уравнении (6) смешивает состояния с различными значениями λ .

Найдем выражения для волновых функций и законов дисперсии ВС. Будем искать решения уравнения (6), не зависящие от φ . Так как в этом случае $SC(\rho) = 0$, то оператор H разбивается на два независимых блока. Для верхнего левого блока $H(\lambda)$ получим уравнения

$$a_{-}(\lambda)C_{1\lambda} + b_{-}(\lambda)C_{-1\lambda} = 0.$$

$$b_{+}(\lambda)C_{1\lambda} + a_{+}(\lambda)C_{-1\lambda} = 0. \quad (8)$$

Решение, сосредоточенное вблизи начала координат $\rho = 0$, для случая $C_{1\lambda} \neq 0$, $C_{-1\lambda} = 0$ удовлетворяет уравнению $b_{+}(\lambda)C_{1\lambda} = 0$ и условию $a_{-}(\lambda) = 0$. Если сделаем замену $C_{1\lambda}(\rho) = \rho^{-1/2}\theta(\rho)$, то получим для $\theta(\rho)$ уравнение, не содержащее особенностей

$$(\lambda\Delta + \hbar\nu_{\perp}\partial/\partial\rho)\theta(\rho) = 0. \quad (9)$$

Будем считать, что $\Delta > 0$. Решая уравнение, получим при условии $\lambda = 1$ затухающую с ростом ρ функцию $C_{1\lambda}(\rho) \sim \delta_{\lambda,1}\chi(\rho)$, где использовано обозначение

$$\chi(\rho) = \rho^{-1/2}\theta(\rho) = \chi_0(1/\sqrt{\rho}) \exp[-(\Delta/\hbar\nu_{\perp})\rho]. \quad (10)$$

Условие $a_{-}(1) = 0$ означает, что функция $C_{1\lambda}(\rho)$ относится к собственному значению

$$\varepsilon = \varepsilon(-) \equiv -\hbar\nu_{\parallel}\kappa_z. \quad (11)$$

Решение $C_{1\lambda} = 0$, $C_{-1\lambda} \neq 0$ удовлетворяет уравнению $b_{-}(\lambda)C_{-1\lambda} = 0$ и условию $a_{+}(\lambda) = 0$. Затухающее с ростом ρ решение возникает в данном случае при условии $\lambda = -1$, т. е. оно относится к нижнему правому блоку уравнения (6) и имеет вид $C_{-1\lambda}(\rho) \sim \delta_{\lambda,-1}\chi(\rho)$. Это решение относится к собственному значению

$$\varepsilon = \varepsilon(+) \equiv +\hbar\nu_{\parallel}\kappa_z. \quad (12)$$

Объединяя оба решения, в итоге для гамильтониана H получим решение в виде

$$C(\rho) = [C_1(\lambda)\delta_{\lambda,1}\Psi_{11} + C_4(\lambda)\delta_{\lambda,-1}\Psi_{-1-1}]\chi(\rho) \exp(ikz), \quad (13)$$

где $C_i(\lambda)$ – неопределённые коэффициенты. Первый столбец этого выражения относится к собственному значению $\varepsilon(-)$ (11), а второй к $\varepsilon(+)$ (12).

Решения при $\Delta < 0$ получаются из (13) изменением знака λ .

Решения для непрерывной части спектра гамильтониана $H(\lambda)$ получим, если волновую функцию представим в виде осциллирующей экспоненты и приравняем нулю детерминант уравнения $H(\lambda)C_{\lambda}(\rho) = 0$.

С учетом изложенного выше можно следующим образом истолковать появление нулевого уровня. В объемном полупроводнике, где $U_{SO}^{\text{surf}} = 0$, энергия возбуждения равна 2Δ . При наличии плоскости раздела $U_{SO}^{\text{surf}} \neq 0$, и энергия возбуждения может быть понижена за счет этого взаимодействия на величину Δ , тогда она совпадает с энергией перехода на этот уровень. Спин-орбитальное взаимодействие также ориентирует спины: они направлены по касательной к окружности $\chi(\rho) = \text{const}$ волновой функции вихря.

Обсудим теперь волновую функцию вихря $\chi(\rho)$. Она совпадает с функцией Макдональда $K_n(z)$ с индексом $n = 1/2$. В точке $\rho = 0$ функция вихря $\chi(\rho)$ имеет нефизическую особенность, связанную с неприменимостью длинноволнового приближения на малых расстояниях $\rho \sim a$. Чтобы устранить особенность, воспользуемся формулой, представляющей собой разложение функции $K_{1/2}$ по функциям $J_{1/2}$.

$$K_{1/2}(\alpha\rho) = \int_0^{\infty} kdk \sqrt{k/\alpha}(1/\alpha^2 + k^2)J_{1/2}(k\rho) = \sqrt{2/(\alpha\rho\pi)} \int_0^{\infty} kdk \frac{\sin(k\rho)}{\alpha^2 + k^2}. \quad (14)$$

Учтем теперь зонный характер спектра полупроводника, заменив в (14) верхний бесконечный предел на $(\pi/2a)$. Получим модифицированную функцию $K_{1/2}^m(\alpha\rho)$. Таким образом, $\chi_m(\alpha, \rho) \sim K_{1/2}^m(\alpha\rho)$. Поведение $K_{1/2}^m(\alpha\rho)$ при малых ρ легко определить. Учитывая конечность верхнего предела в интеграле, $\sin(k\rho)$ в подынтегральном выражении можно разложить в ряд, и мы получим $\chi_m(\alpha, \rho) \sim \rho^{1/2}$ вместо $\chi(\alpha, \rho) \sim \rho^{-1/2}$ для исходной функции. В области больших ρ функция $\chi_m(\alpha, \rho)$ близка $\chi(\alpha, \rho)$. Чтобы найти зависимость функций $\chi_m(\alpha, \rho), \chi(\alpha, \rho)$ от ρ , а также от их параметров, введем безразмерные переменные $\gamma = \alpha a, \eta = \rho/a$. Вместо функций $\chi_m(\alpha, \rho), \chi(\alpha, \rho)$, получим выражения $\chi_m(\gamma, \eta), \chi(\gamma, \eta)$. Обе функции нормированы так, что выполняются условия $\int_0^{2\pi} \int_0^\infty d\varphi \eta d\eta \chi_m^2 = 1$ для функции $\chi_m(\gamma, \eta)$ и аналогичное условие для $\chi(\gamma, \eta)$. На рис. 1 представлены функции $\chi_m(\gamma, \eta)$ и $\chi(\gamma, \eta)$ при $\gamma = 0.01$.

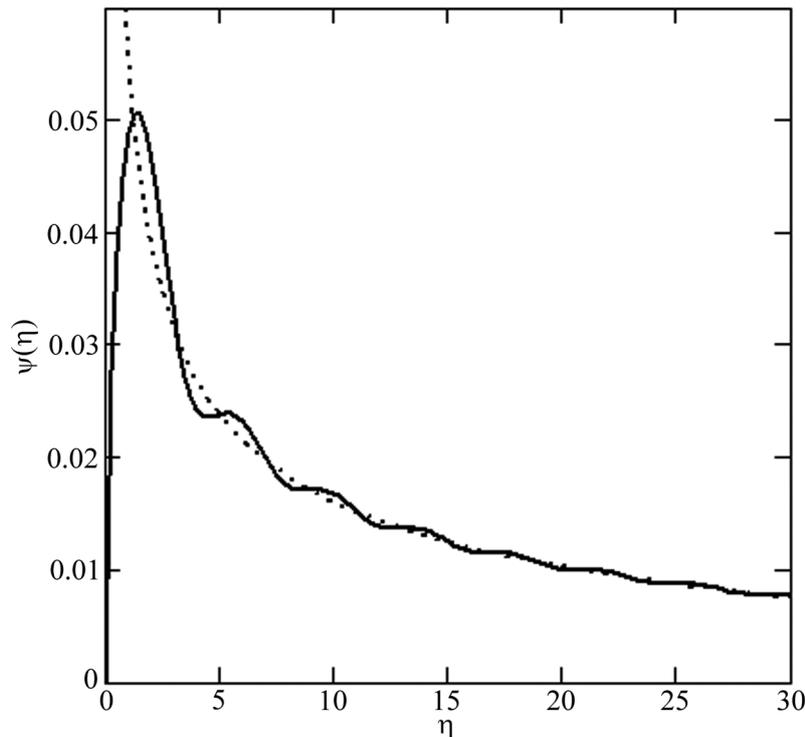


Рис. 1: Зависимость амплитуды волновой функции вихря от расстояния η (сплошная кривая), параметр затухания $\gamma = 0.01$. Пунктирной кривой изображена волновая функция, рассчитанная в длинноволновом приближении.

Из предыдущего можно сделать вывод, что ВС локализуется на поверхности цилиндра с радиусом порядка постоянной решетки и осью, параллельной оси z . При этом

образование вихря не зависит от знака параметра щели в объеме. Гипотетическая зонная схема, соответствующая свойствам волновой функции $\chi_m(\alpha, \rho)$, приведена на рис. 2.

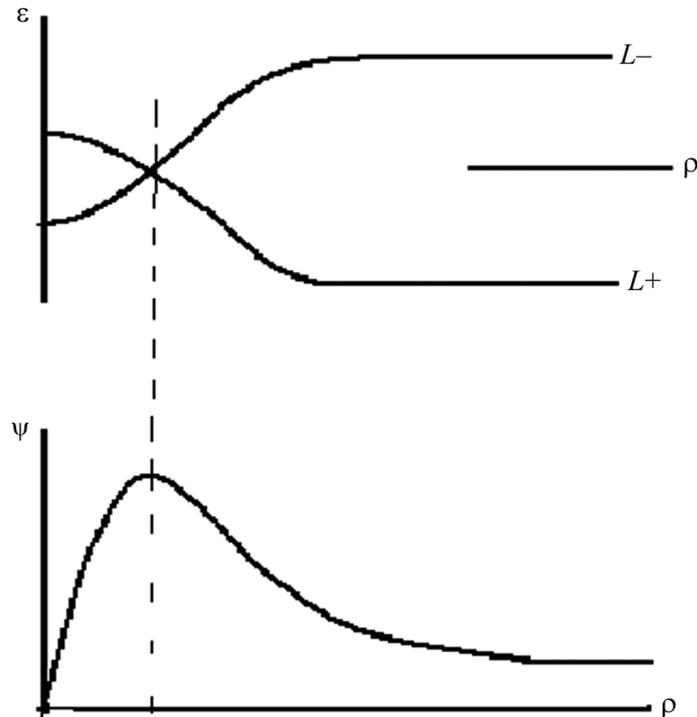


Рис. 2: Радиальная часть волновой функции ВС, а также соответствующая ее свойствам зонная схема.

Полупроводник типа PbTe с двухзонным спектром использовался нами как простая модель для теоретических расчётов. При этом мы отвлекались от существования нескольких долин. Наличие чётного числа долин, в общем случае, опасно для существования безщелевых состояний [4]. Один из способов избежать этой опасности состоит в выборе поверхности и использовании симметрии между эквивалентно расположенными по отношению к ней долинами [5, 6]. Соображения работы [6] были подтверждены экспериментально в [4], где на поверхности (0, 0, 1) полупроводника $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Se}$ методом ARPES наблюдались ПС, которые проявлялись в спектре в виде дираковских конусов.

Так как ВС в смысле симметрии эквивалентны ПС, то соображения [6] применимы и к ним. Следовательно, ВС должны существовать и наблюдаться в плоских структурах полупроводников $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Se}$.

Обсудим теперь условия, способствующие образованию вихрей. Пусть образец находится в термодинамическом равновесии. Тогда в идеальном случае термодинамический

потенциал располагается в середине щели. В этих условиях образование вихрей невыгодно, поскольку предполагает заполнение состояний, находящихся выше дна валентной зоны. Ситуация меняется, если к обеим поверхностям плоского образца приложено напряжение и в обеих зонах создается некоторое число неравновесных носителей. Тогда образование состояний в щели и их заполнение способствует сдвигу квазиуровней Ферми к центру зоны к их равновесному положению, и образование вихрей оказывается энергетически выгодным.

Итак, теория указывает на то, что в плоских структурах двузонных полупроводников при любом знаке щелевого параметра могут существовать вихревые состояния с линейным электронным спектром. Эти состояния становятся стабильными при приложении к обеим сторонам плоского образца электрического напряжения.

Благодарю Н. Н. Сибельдина за обсуждение данной работы.

Л И Т Е Р А Т У Р А

- [1] M. Z. Hasan and C. L. Kane, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 3045 (2010).
- [2] Xiao-Liang Qi and Shou-Cheng Zhang, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1057 (2011).
- [3] M. Konig et al., *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 031007 (2008).
- [4] P. Dziawa et al., *Nature Materials* **11**, 1023 (2012); DOI: 10.1038/NMAT3449.
- [5] L. Fu, *PRL* **106**, 106802 (2011).
- [6] T. Hsieh et al., *Nat. Commun.* **3**, 982 (2012); DOI: 10.1038/ncomms1969.
- [7] M. Konig et al., *Science* **318**, 766 (2007).
- [8] Б. А. Волков, О. А. Панкратов, А. В. Сазонов, *ЖЭТФ* **85**, 1395 (1983).
- [9] В. С. Виноградов, *Краткие сообщения по физике ФИАН*, № 7–8, 62, 68 (1995).

Поступила в редакцию 10 июля 2018 г.

После переработки 24 декабря 2018 г.

Принята к публикации 30 января 2019 г.