УДК 538.9

Моделирование квантовой емкости топологических изоляторов

Зайцев В.А., Данилюк А.Л.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
г. Минск, Республика Беларусь

Представлены результаты моделирования квантовой емкости топологического изолятора в зависимости от энергии Ферми и напряженности внешнего магнитного поля до 100 кЭ. Показано, что осцилляции квантовой емкости при варьировании энергии Ферми и напряженности магнитного поля обусловливаются видом плотности состояния и квантованием уровней по Ландау. Полученные результаты могут использоваться для интерпретации экспериментальных данных по уточнению плотности состояний топологических изоляторов.

Одним из интенсивно развивающихся направлений физики твердого тела является поиск и исследование новых материалов, демонстрирующих уникальные электронные свойства. Использование таких материалов в области обработки информации позволит создать приборы нового поколения, обладающих более высокими параметрами по сравнению с существующими. К таким перспективным материалам относится класс узкозонных полупроводников с инвертированной запрещенной щелью, так называемые топологические изоляторы (ТИ). ТИ относятся к физическим объектам, которые являются

изоляторами в объеме, но проводят проводниками по поверхностным или граничным состояниям. В этих материалах проводимость осуществляется по краевым электронным состояниям в случае двумерных топологических изоляторов или по поверхностным состояниям, если речь идет о трехмерных топологических изоляторах. Появление проводящих электронных состояний в топологических изоляторах определяется свойствами объема изолятора и не связано со структурой границы. Проводящие состояния в топологических изоляторах не могут быть устранены изменением структуры границы: они являются устойчивыми по отношению к рассеянию на дефектах, изменению формы границы и ее химической пассивации [1,2]. Такие необычные свойства поверхности ТИ дают потенциальную возможность для их использования в новых спинтронных и магнетоэлектрических приборах, а также для создания квантовых компьютеров.

Ключевым условием для реализации топологического изолятора является особенная структура электронных состояний, вызванная сильным спин-орбитальным взаимодействием в материале. Топологические изоляторы демонстрируют уникальные свойства, обусловленные поверхностными состояниями дираковского типа, которые защищены симметрией обращения времени. Теория предсказывает, что поверхностные состояния демонстрируют квантовый спиновый эффект Холла. Однако до настоящего времени исследования поверхностных состояний ТИ с помощью обычных транспортных измерений остается серьезной проблемой из-за влияния вклада объемных носителей заряда. Экспериментальное наблюдение осцилляций

Шубникова-де Гааза в измерениях квантовой емкости дает хорошие перспективы изучения их свойств. Причем измерения квантовой емкости существенно защищены от объемных помех.

Квантовая емкость позволяет напрямую исследовать поверхностную плотность состояний, которая чувствительна к механизмам рассеивания [3,4]. Таким образом, измерение квантовой емкости дает количественное описание плотности состояний (DOS) на уровне Ферми. Величина квантовой емкости определяется в виде [3]

$$C_Q = e\frac{\partial Q}{\partial \varepsilon_F} = e^2\frac{\partial n_e}{\partial \varepsilon_F} = e^2 D_T(H) \qquad (1)$$

где n_e – концентрация носителей заряда, ε_F = энергия Ферми, e – элементарный заряд. Температурная зависимость DOS от напряженности внешнего магнитного поля H определяется соотношением

$$D_T(H) = \frac{\partial n_e}{\partial \varepsilon_F} = \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\partial f(\varepsilon - \varepsilon_F)}{\partial \varepsilon_F} D(\varepsilon) \qquad (2)$$

Где $f(\varepsilon\text{-}\varepsilon_F)$ – функция Ферми-Дирака. При низкой температуре можно допустить, что $D_T(H)= D(\varepsilon_F)$. Для гауссова уширения уровней Ландау DOS на единицу площади имеет вид [3]

$$D(\varepsilon_F) = D_0 \left[1 + 2 \sum_{\tau_z k=1}^{\infty} \begin{matrix} (-1)^k \exp\left[-\left(\dfrac{2\sqrt{2}\pi k \varepsilon_F \Gamma}{(h/2\pi)^2 \omega^2} \right)^2 \right] \cdot \\ \cos\left[\dfrac{2\pi k}{(h/2\pi)^2 \omega^2} (\varepsilon_F^2 - (\Delta_z + \tau_z \Delta_h)^2) \right] \end{matrix} \right] \quad (3)$$

где $D_0 = |\varepsilon_F| / \pi (h/2\pi)^2 v^2$; $\omega = v\sqrt{e\mu_0 H/(h/2\pi)}$; Г – ширина распределения Гаусса для уровней Ландау (Г - индуцированное примесями уширение уровней Ландау), ω – циклотронная частота дираковских фермионов, τ_z=±1 обозначает симметричные и антисимметричные поверхностные состояния ТИ соответственно, Δ_z =(1/2)$g\mu_B\mu_0 H$, g - фактор Ланде, μ_B – магнетон Бора, Δ_h - матричный элемент гибридизации Δ_h между верхней и нижней поверхностями ТИ (учитывает туннелирование между двумя поверхностными состояниями ТИ), D_0 - плотность состояний в нулевом магнитном поле, v скорость Ферми для дираковских фермионов, h - постоянная Планка, μ_0 – магнитная постоянная.

С помощью уравнений (1) - (3) вычислена квантовая емкость модельного ТИ в зависимости от энергии Ферми и напряженности магнитного поля. Использовались следующие значения параметров: v=3 10^5 м/с, Δ_z=2-5 мэВ, Г=0.3 мэВ, Δ_h=2-5 мэВ, H=1-100 кЭ, ε_F=-0.05…+0.05 эВ. Полученные результаты расчета квантовой емкости C_Q в зависимости от энергии Ферми приведена на рисунке 1, а в зависимости от напряженности магнитного поля на рисунке 2.

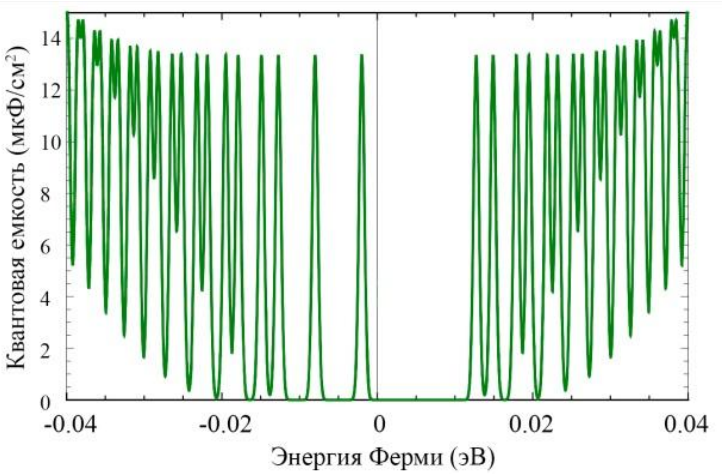

Рисунок 1 – Зависимость квантовой емкости от энергии Ферми при H=30 кЭ, Δ_z=5 мэВ, Δ_h=4 мэВ.

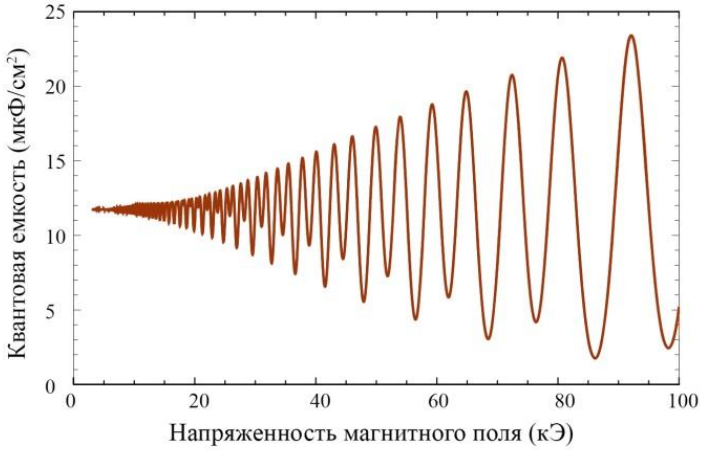

Рисунок 2 – Зависимость квантовой емкости от напряженности магнитного поля при Г=0.3 мэВ, ε_F =0.03 эВ, Δ_h=4 мэВ, n_e= 4 10^{15} $м^{-2}$, v=3 10^5 м/с.

Полученные закономерности квантовой емкости соответствуют колебаниям плотности состояний ТИ в магнитном поле из-за квантования уровней Ландау. Как можно видеть из рис.1 амплитуда колебаний квантовой емкости и соответственно плотности состояний уменьшается с ростом энергии Ферми при постоянной напряженности магнитного поля, в тоже время эта амплитуда нарастает с увеличением напряженности магнитного поля, рис.2. Это соответствует экспериментальным данным по измерению осцилляций Шубникова-де Гааза. Полученные результаты моделирования могут быть использованы для интерпретации экспериментальных данных по измерению квантовой емкости, магнитосопротивления и уточнению деталей плотности состояний топологических изоляторов.

Список использованных источников:

1. Hasan, M.Z. Colloquium: Topological insulators / M.Z. Hasan, C.L. Kane// Reviews of Modern Physics – 2010. – Vol. 82, Iss.4. - P.3045-3068.

2. Qi, X.-L. Topological insulators and superconductors/ X.-L. Qi, S.-C. Zhang // Reviews of Modern Physics – 2011. – Vol. 83, Iss.4. - P.1057-1110.

3. Tahir, M. Quantum capacitance of an ultrathin topological insulator film in a magnetic field / M. Tahir, K. Sabeeh, U. Schwingenschlőgl // Scientific Reports – 2013. – Vol. 3. - Article number: 1261.

4. Козлов, Д.А. Квантовая емкость трехмерного топологического изолятора на основе HgTe / Д.А. Козлов [и др.] // Физика низких температур – 2017. – Т. 43, № 4. – С.537-545.