

На правах рукописи

**Асеев Павел Павлович**

**Влияние неидеальных контактов и  
межэлектронного взаимодействия на электронные  
и спиновые свойства низкоразмерных систем**

01.04.07 — Физика конденсированного состояния

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Москва 2013

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова Российской академии наук (ИРЭ им. В. А. Котельникова РАН)

**Научный руководитель:** **Артеменко Сергей Николаевич**  
доктор физико-математических наук,  
главный научный сотрудник

**Официальные оппоненты:** **Бурмистров Игорь Сергеевич**  
доктор физико-математических наук,  
ФГБУН Институт теоретической  
физики им. Л. Д. Ландау РАН,  
старший научный сотрудник сектора  
квантовой мезоскопии

**Сабликов Владимир Алексеевич**  
доктор физико-математических наук,  
ФГБУН Институт радиотехники и  
электроники им. В. А. Котельникова РАН,  
Фрязинский филиал,  
главный научный сотрудник лаборатории  
теоретических проблем микроэлектроники

**Ведущая организация:** ФГБУН Институт физики полупроводников  
им. А. В. Ржанова СО РАН

Защита состоится 20 декабря 2013 г. в 10<sup>00</sup> на заседании диссертационного совета Д.002.231.01 при ИРЭ им. В. А. Котельникова РАН по адресу: 125009, г. Москва, ул. Моховая, д. 11, корп. 7.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН.

Автореферат разослан 18 ноября 2013 года.

Ученый секретарь диссертационного совета,  
доктор физико-математических наук,  
профессор



С. Н. Артеменко

## Общая характеристика работы

**Актуальность темы.** Физика низкоразмерных (одномерных, квазиодномерных, двумерных) электронных систем является одним из ключевых направлений современной физики конденсированного состояния. Одномерные (1D) электронные системы могут быть реализованы в проводниках, у которых размеры в поперечном направлении имеют порядок фермиевской длины волны электронов данного проводника, так что из-за размерного квантования электроны становятся эффективно одномерными. Примерами таких систем могут служить полупроводниковые квантовые проволоки, металлические атомные цепочки на поверхности диэлектрика, углеродные нанотрубки, краевые состояния в квантовом эффекте Холла, длинные проводящие органические молекулы.

Другим важным примером 1D электронной системы может служить краевое состояния двумерных (2D) топологических изоляторов (ТИ) — материалов, к которым за последние несколько лет проявляется нарастающий интерес. Одной из важных характеристик ТИ является то, что хотя сам материал проявляет свойства изолятора, поверхность 3D ТИ и край 2D ТИ содержит проводящие состояния. Важной особенностью поверхностных и краевых проводящих состояний в ТИ является связь между спином и импульсом электронов, из-за чего ТИ считаются одним из перспективных материалов спинтроники.

К физике низкоразмерных систем, в частности 2D и квазиодномерных систем, относятся и физические явления на поверхности: например, фазовый переход при образовании поверхностной волны зарядовой плотности (ВЗП). При этом механизм фазовых переходов в низкоразмерных системах имеет важные отличия от механизма 3D фазовых переходов, в первую очередь связанные с ключевой ролью флуктуаций в низкоразмерных системах.

Ещё одной ключевой особенностью, обуславливающей научный интерес к низкоразмерным системам, является сильное влияние межэлектронного взаимодействия на электронные свойства таких систем. Так, например, для 1D систем известно, что взаимодействующие электроны не описываются в рамках теории ферми-жидкости Ландау, и таким образом задача об электронном транспорте становится существенно многочастичной, не сводимой к представлению о невзаимодействующих квазичастицах. Кроме того, если попытаться учесть взаимодействие по теории возмущений, то окажется, что поправка любого порядка обращается в бесконечность из-за расходимостей на низких энергиях. Это означает, что даже слабое межэлектронное взаимодействие качественно меняет поведение 1D систем.

Что касается 2D систем, хотя теория ферми-жидкости, как правило, к ним применима, влияние дальнегодействующего межэлектронного взаимодействия на

флуктуационные свойства всё же велико. Так, например, для известного утверждения о том, что длинноволновые флуктуации в 2D системах подавляют фазовые переходы, является существенным предположение об отсутствии дальнего действующего кулоновского взаимодействия.

Третьей важной особенностью низкоразмерных систем является то, что электронный и спиновый транспорт в таких системах сильно зависит от контактов. Объёмные металлические электроды, присоединённые контактами к системе более низкой размерности, могут играть роль термостата, обуславливая релаксацию возбуждений в низкоразмерных системах и во многом определяя флуктуационные свойства. С другой стороны, на практике изготовление идеальных контактов затруднено, а неидеальный контакт играет роль неоднородности, которая, например, в 1D коррелированной системе может качественно изменить электронный транспорт.

В настоящий момент вопросы, связанные с влиянием межэлектронного взаимодействия и неидеальных контактов на электронные и спиновые свойства низкоразмерных систем, не являются полностью изученными, поскольку механизмы проводимости в таких системах сильно отличаются от стандартных механизмов электронного транспорта. В то же время вопрос об электронных и спиновых свойствах низкоразмерных систем представляет интерес в связи с современной тенденцией миниатюризации электронных приборов и совершенствованием элементной базы современной наноэлектроники и спинтроники.

**Целью диссертационной работы** является исследование проблем, связанных с влиянием контактов и межэлектронного взаимодействия на электронные и спиновые свойства низкоразмерных систем: 1D коррелированных квантовых проводников, 2D поверхностей материалов, допускающих образование ВЗП, 1D краевых и 2D поверхностных состояний ТИ.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие задачи:

1. Теоретически описать новый динамический режим проводимости в 1D коррелированном квантовом проводнике с неидеальными контактами, вычислить вольт-амперные характеристики;
2. Описать роль длинноволновых флуктуаций и межэлектронного взаимодействия в механизме образования волны зарядовой плотности на поверхности диэлектрика;
3. Описать влияние туннельных контактов на электронные и спиновые свойства краевого и поверхностного состояний топологических изоляторов, предложить структуру, генерирующую чисто спиновый ток во внешнюю

цепь, и вычислить зависимость спинового тока от приложенного электрического напряжения.

**Научная новизна.** В рамках диссертационной работы был впервые предсказан динамический режим в коррелированном квантовом проводнике с неидеальными контактами, в котором при постоянном приложенном напряжении постоянный электрический ток  $I$  сопровождается осциллирующим с частотой  $f = I/e$  током. Впервые было показано, что дальнедействующее кулоновское взаимодействие может стабилизировать образование поверхностной ВЗП, что объясняет возможность наблюдения поверхностной ВЗП в недавних экспериментах. Впервые были предложены структуры на основе 2D и 3D ТИ, которые могут генерировать чисто спиновый ток во внешней цепи, а также произведено теоретическое описание электронного и спинового транспорта в таких структурах.

**Достоверность** полученных результатов подтверждается тем, что при расчётах использовались проверенные методы теоретической физики, признанием полученных результатов научной общественностью при обсуждениях на научных семинарах и конференциях, а также положительными рецензиями статей при публикации результатов исследования в научных журналах.

**Практическая значимость.** В работе предсказан режим электропроводности, которому соответствует эффект высокочастотной генерации переменного тока при приложенном постоянном напряжении на неидеальных контактах к 1D системе. Показано, что дальнедействующее кулоновское взаимодействие стабилизирует образование волны зарядовой плотности на поверхности диэлектрика. Описано влияние релаксации в электродах, туннельным образом подключённых к ТИ, на электронный и спиновый транспорт в краевом/поверхностном состоянии ТИ, а также предложена структура на основе ТИ, позволяющая генерировать чисто спиновый ток во внешней цепи. Эти результаты важны для понимания фундаментальных транспортных и флуктуационных свойств низкоразмерных систем, которое необходимо для разработки элементной базы наноэлектроники и спинтроники.

#### **Основные положения, выносимые на защиту:**

1. Выведены граничные условия, описывающие неидеальный контакт коррелированной квантовой проволоки с объёмным электродом и позволяющие учесть релаксацию за счёт контактов;
2. Предсказано, что в коррелированной квантовой проволоке с неидеальными контактами возможен нестационарный режим аналогичный динамическому режиму проводимости в квантовой проволоке с примесью и по своим проявлениям напоминающий эффект Джозефсона и кулоновскую блокаду;

3. Установлено, что, хотя дальний порядок поверхностной ВЗП не существует, корреляционная функция спадает не экспоненциальным образом, а более медленным степенным. Экранированное межэлектронное взаимодействие уменьшает показатель степени, стабилизируя ВЗП, так что свойства поверхностной ВЗП в кристалле конечных размеров могут быть такими же как при дальнем порядке. Неэкранированное кулоновское взаимодействие восстанавливает дальний порядок;
4. Исследовано влияние туннельных контактов на свойства 2D и 3D ТИ и обнаружено сильное влияние контактов на релаксацию электронов в ТИ. Найдены зависимости спиновых и зарядовых токов во внешней цепи от размеров контактов, величины туннельной прозрачности, а в случае 3D ТИ и от длины свободного пробега электронов. Предложены структуры, генерирующие чисто спиновый ток во внешней цепи.

**Апробация работы.** Результаты диссертации были доложены на российских и международных конференциях:

1. 18th International Symposium “Nanostructure: Physics and Technology”, Санкт-Петербург, 21–27 июня 2010 г.
2. Advanced Research Workshop “Fundamentals of electronic nanosystems NanoPeter 2010”, Санкт-Петербург, 29 июня–2 июля 2010 г.
3. International School and Workshop on Electronic Crystals “ECRYS-2011”, Каржез, Франция, 15–27 августа 2011 г.

**Публикации.** По теме диссертации опубликовано 4 научные статьи, из них 4 опубликовано в журналах, включённых в Перечень ВАК, в том числе 3 статьи российских [А1–А3] и 1 статья в зарубежном журнале [А4].

**Личный вклад автора** заключается в участии в постановке задачи и построении теоретического подхода, на основе которого строится решение, проведении аналитических исследований, в написании научных статей и их подготовке к публикации.

**Объем и структура работы.** Диссертация состоит из введения, 3 глав, заключения и 6 приложений. Полный объем диссертации составляет 95 страниц с 5 рисунками. Список литературы содержит 38 наименований.

## Содержание работы

Во **введении** обосновывается актуальность исследований, проведённых в рамках данной диссертационной работы, сформулированы цели диссертацион-

ной работы, ставятся задачи работы, аргументирована научная новизна исследований, показана практическая значимость представляемой работы, и приведены основные положения, выносимые на защиту.

**Первая глава** посвящена исследованию электронного транспорта в 1D коррелированном квантовом проводе с неадиабатическими контактами. Рассматривается бесспиновая (спин-поляризованная) 1D электронная система с короткодействующим межэлектронным взаимодействием. Короткодействующее взаимодействие соответствует случаю полупроводниковых квантовых проволок, в которых дальнедействующая часть кулоновского взаимодействия экранируется металлическим затвором.

В диссертационной работе отмечается известный факт, что взаимодействующая система 1D электронов не описывается в рамках модели фермижидкости Ландау. Вместо этого взаимодействующие электроны описываются согласно представлениям о жидкости Латтинджера [1, 2], в которой элементарными возбуждениями являются не одночастичные фермионные возбуждения, а коллективные бозонные моды, соответствующие волнам электронной плотности. Используется модель Томонаги-Латтинджера и техника бозонизации. Взаимодействие описывается параметром  $K_\rho$ , который принимает значения от 0 до 1, причём  $K_\rho = 1$  в случае отсутствия взаимодействия. Параметр  $K_\rho$  связан с фурье-компонентой потенциала взаимодействия  $g(q)$  соотношением  $K_\rho^{-1} = \sqrt{1 + \frac{g(q=0)}{\pi v_F}}$ . Бесспиновая (спин-поляризованная) 1D система описывается бозонным полем  $\hat{\Phi}$ . В представлении Гейзенберга операторы плотности электронов и тока связаны с этим полем соотношениями:

$$\hat{\rho}(x, t) = \frac{k_F}{\pi} - \frac{1}{\pi} \partial_x \hat{\Phi}(x, t) + \frac{k_F}{\pi} \cos \left( 2k_F x - 2\hat{\Phi}(x, t) \right), \quad \hat{j}(x, t) = \frac{1}{\pi} \partial_t \hat{\Phi}(x, t)$$

Слагаемое  $\frac{k_F}{\pi} \cos \left( 2k_F x - 2\hat{\Phi}(x, t) \right)$  в выражении для  $\hat{\rho}(x, t)$  отвечает за фриделевские осцилляции (ФО) и в свободной жидкости Латтинджера при квантовомеханическом усреднении зануляется. Эволюция бозонного поля  $\hat{\Phi}$  описывается волновым уравнением:

$$\partial_t^2 \hat{\Phi} = \frac{v_F^2}{K_\rho^2} \partial_x^2 \hat{\Phi}$$

В первой главе ставится задача описать электронный транспорт в 1D системе, к которой подключены металлические 2D или 3D электроды (рисунок 1). Рассматриваются два случая:

1. Случай резкого прямоугольного контакта;

2. Система с плавно (адиабатически) расширяющимися электродами, но со ступенькой потенциала в точке контакта, от которой могут отражаться электроны.

В разделе «Вывод граничных условий» показано, что оба вышеперечисленных вида неидеальных контактов можно описать с помощью граничных условий на левом (правом) контакте, полученных сшивкой полевых операторов в точке контакта:

$$\frac{v_F}{\mathcal{T} K_\rho^2} \hat{\rho}_{sm} \pm \hat{j} + f v_F \hat{\rho}_F = \hat{P}_{L,R}, \quad (1)$$

где  $\hat{\rho}_{sm}$  — оператор плавной компоненты плотности электронов,  $\hat{j}$  — оператор электрического тока,  $\hat{\rho}_F$  — оператор быстрой  $2q_F$ -компоненты электронной плотности, соответствующей ФО.  $\mathcal{T}$  — параметр, принимающий значения от 0 до 1 и описывающий неидеальность контакта, причём идеальному контакту соответствует  $\mathcal{T} = 1$ . В случае отсутствия межэлектронного взаимодействия,  $\mathcal{T}$  совпадает с прозрачностью системы. Параметр  $f$  в случае почти идеального контакта ( $1 - \mathcal{T} \ll 1$ ), который рассматривается в диссертационной работе, связан с  $\mathcal{T}$  соотношением  $f \simeq \sqrt{2(1 - \mathcal{T})}$ . Правая часть граничного условия  $\hat{P}_{L,R}$  представляет квадратичную форму операторов уничтожения электронов электроде, причём среднее значение соответствует потенциалу  $U_{L,R}$ , приложенному к левому (правому) электроду

$$\langle \hat{P}_{L,R} \rangle = \frac{U_{L,R}}{2\pi}, \quad (2)$$

Операторы  $\hat{P}$  удовлетворяют следующим (анти)коммутиционным соотношениям

$$\begin{aligned} \left[ \hat{P}(\omega_1), \hat{P}(\omega_2) \right] &= -(2\pi)^2 \omega_1 \delta(\omega_1 + \omega_2) \\ \left\langle \left\{ \hat{P}(\omega_1), \hat{P}(\omega_2) \right\} \right\rangle &= (2\pi)^2 \omega_1 \text{cth} \frac{\omega_1}{2T} \delta(\omega_1 + \omega_2) \end{aligned}$$

Таким образом, выведенные граничные условия для операторов физических величин позволяют учесть релаксацию за счёт контактов.

Множитель  $K_\rho^2$  в граничном условии (1), как показано в подразделе «Учёт взаимодействия в 1D», появляется из-за экранирования потенциала короткодействующего взаимодействия затвором.

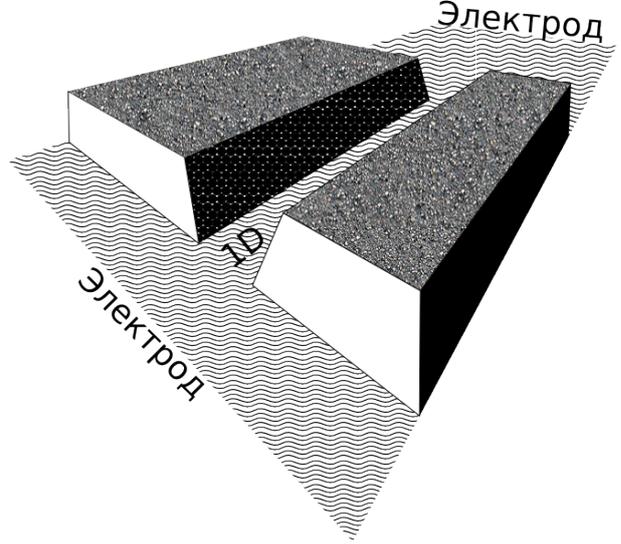


Рис. 1: Резкий контакт 1D проводника с 2D/3D электродами

В случае идеального контакта ( $\mathcal{T} = 1$ ,  $f = 0$ ) усреднение граничных условий (1) приводит к известным граничным условиям Эггера и Граберта [3,4].

В разделе «Транспортные свойства в стационарном случае» показывается, что решение задачи об электронном транспорте в квантовой проволоке с неидеальными контактами допускает решение с нулевым током при напряжении ниже некоторого порогового напряжения  $V_T$ :

$$V_T \simeq f^{\frac{1+K_\rho}{1-K_\rho}} \varepsilon_F \quad (3)$$

При этом предполагается, что проволока достаточно длинная  $L > \frac{v_F}{K_\rho V_T}$ , и температура  $T \ll \frac{eV_T}{k_B}$ . Полученный результат об обращении тока в нуль при  $V < V_T$  является следствием приближения о гауссовости флуктуаций, которое, строго говоря, не выполняется. Учёт негауссовых флуктуаций солитонного типа, предположительно (по аналогии с ситуацией с примесью в квантовом проводе [1]), привёл бы к появлению степенной вольт-амперной характеристики, т.е. ненулевого, но малого тока при напряжениях ниже порогового. Однако, гауссово приближение позволяет сделать грубую оценку для порогового напряжения  $V_T$  (3).

В разделе «Динамический режим проводимости» рассматривается ситуация, когда приложенное напряжение много больше порогового напряжения  $V_T$ , и исследуется возникающий в этом случае динамический режим проводимости.

Из уравнения движения (2) и граничных условий выводится уравнение для бозонного оператора  $\hat{\Phi}_L$  в точке левого контакта

$$-i\omega Y(\omega)\hat{\Phi}_L(\omega) - \hat{S}_L(\omega)W(\omega) + \hat{S}_R(\omega) = \hat{P}^R(\omega) - \hat{P}^L(\omega)W(\omega), \quad (4)$$

где  $Y(\omega)$ ,  $Z(\omega)$  — записанные в частотном представлении функции памяти, которые описывают отражение бозонных возбуждений жидкости Латтинджера от контактов и определяются как

$$Y = \frac{e^{i\omega L K_\rho / v_F} (1 - K_\rho)^2 - e^{-i\omega L K_\rho / v_F} (1 + K_\rho)^2}{2K_\rho}$$

$$W = \cos \frac{\omega L K_\rho}{v_F} + iK_\rho \sin \frac{\omega L K_\rho}{v_F},$$

а  $\hat{S}_{L,R} = f\varepsilon_F \sin(2\hat{\Phi}_{L,R} + \alpha_{L,R})$  — оператор, соответствующий фриделевской осцилляции на левом (правом) контакте.

Для решения задачи используется самосогласованное гармоническое приближение, которое, как обсуждается в разделе «Применимость гармонического приближения», применимо или в случае малых  $K_\rho$ , или в случае когда

напряжение  $V$  значительно превышает пороговое напряжение  $V_T$ . В режиме заданного тока  $I$  термодинамически усреднённая фаза линейно зависит от времени  $\langle \hat{\Phi}_L \rangle = \frac{\omega_0 t}{2}$ , где  $\omega_0 = 2\pi \frac{I}{e}$ . Тогда перенормированный флуктуациями потенциал ФО тоже зависит от времени.

$$f \varepsilon_F e^{-2\langle \varphi^2(t) \rangle} = d_0 + d_1 \cos(\omega_0 t + \alpha)$$

Коэффициент  $d_0$ , отвечающий за усреднённый по времени потенциал фриделевских осцилляций, а также  $d_1$ , отвечающий за временную зависимость, находятся самосогласованным образом и оказываются равными

$$d_0 = V_T \left( \frac{V_T}{\omega_0} \right)^{\frac{2K_\rho}{1-3K_\rho}}$$

$$d_1 \simeq \frac{d_0^2}{\omega_0} \sin \frac{\omega_0}{d_0}$$

При слабом взаимодействии  $K_\rho \geq 1/3$  фриделевские осцилляции у контактов размываются большими флуктуациями, и динамический режим не проявляется, а вместо него имеет место обычная линейная проводимость.

При  $K_\rho < 1/3$  в режиме заданного напряжения имеет место динамический режим проводимости: постоянная компонента тока  $\bar{I}$  сопровождается осцилляциями с частотой  $f = I/e$  и амплитудой

$$I_{ac} \simeq \frac{2G_0 d_0 K_\rho}{\sqrt{K_\rho^2 + \tan^2 \frac{\omega_0 t L K_\rho}{2v_F}}}$$

Постоянная компонента тока помимо линейного по напряжению вклада  $G_0 V$  содержит отрицательную нелинейную поправку, исчезающую в пределе высоких напряжений

$$I_{nl} = G_0 \left[ \frac{d_0^2 K_\rho^2}{\omega_0 \left( K_\rho^2 + \tan^2 \frac{\omega_0 L K_\rho}{2v_F} \right)} - d_1 \right]$$

**Вторая глава** посвящена исследованию влияния кулоновского взаимодействия на образование поверхностной ВЗП. В отличие от 3D систем, где флуктуации, как правило, малы, в 2D системах флуктуации могут качественно менять поведение электронов. Хорошо известно, что в низкоразмерных (1D и 2D) непрерывных системах с короткодействующим взаимодействием дальний порядок подавляется длинноволновыми флуктуациями. Это означает, что 2D ВЗП будет подавляться флуктуациями фазы. Однако, существуют экспериментальные свидетельства существования 2D ВЗП в слоистых структурах [5]. В экспериментах [6] обнаружено, что критическая температура для поверхностной ВЗП в NbSe<sub>3</sub> выше, чем для объёмной.

Похожая ситуация проявляется в 2D сверхпроводниках: в них, действительно, нет дальнего порядка [7]. Ниже критической температуры перехода Березинского-Костерлица-Таулесса корреляционная функция параметра порядка имеет степенной вид, и, следовательно, возникает «псевдодальний» порядок.

Во второй главе исследуется, как спадает дальний порядок в несоизмеримой поверхностной ВЗП, а кроме того, рассматривается, как на это спадание может влиять дальнедействующее кулоновское взаимодействие.

Рассматривается система, состоящая из проводящих цепочек на поверхности 3D изолятора (рисунок 2). Электроны на поверхности образуют квазиодномерную электронную систему, взаимодействующую с объёмными фонанами. Для образования ВЗП необходимо, чтобы поверхность Ферми переходила в себя при параллельном переносе на вектор нестинга  $\mathbf{Q}$ : в рассматриваемой модели считается, что поверхность Ферми представляет из себя две параллельные гофрированные прямые. При этом проекция скорости  $\frac{d\epsilon}{d\mathbf{p}}$  электронов на поверхности Ферми вдоль цепочек  $v_x$  много больше проекции скорости на направление, перпендикулярное цепочкам  $v_y$ .

Сначала рассматривается случай невзаимодействующих электронов на основе формализма функциональных интегралов в мацубаровском времени. Электронная подсистема описывается фермионным полем

$$\psi(x, y, z) = \psi(x, y)w(z),$$

где  $w(z)$  — волновая функция, описывающая состояние, локализованное у поверхности. Предполагается, что  $w(z)$  затухает вглубь изолятора экспоненциально с обратной длиной затухания  $\kappa^{-1}$ :

$$W(z) = |w(z)|^2 = \kappa e^{-\kappa z}.$$

Для описания фоновой подсистемы стандартным образом вводится фоновое поле  $\varphi$ , связанное с операторами рождения-уничтожения трёхмерных фононов  $\hat{b}_{\vec{q}}^\dagger, \hat{b}_{\vec{q}}$  с импульсом  $\vec{q}$  соотношением

$$\hat{\varphi}_{\vec{q}}(\omega) = \sqrt{\frac{\omega_0(q)}{2}} \left[ \hat{b}_{\vec{q}}(\omega) + \hat{b}_{-\vec{q}}(-\omega) \right],$$

где  $\omega_0(q) = s|q|$  — спектр акустических фононов.

В образовании ВЗП участвуют фононы с импульсом близким к вектору нестинга  $\pm\mathbf{Q}$  и электроны вблизи

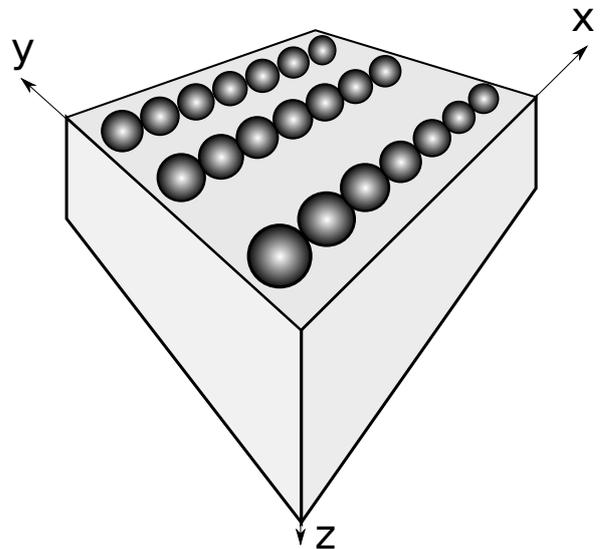


Рис. 2: Проводящие цепочки на поверхности 3D изолятора

поверхности Ферми. Поэтому удобно выделить быструю и медленную части в электронных и фоновых полях

$$\begin{aligned}\varphi(x, y, z) &= \varphi_Q(x, y, z)e^{i(\mathbf{Q}, \mathbf{r}_{\parallel})} + \varphi_{-Q}(x, y, z)e^{-i(\mathbf{Q}, \mathbf{r}_{\parallel})} \\ \psi(x, y) &= \psi_+(x, y)e^{ixQ/2} + \psi_-(x, y)e^{-ixQ/2},\end{aligned}$$

где зависимость  $\varphi_{\pm Q}, \psi_{\pm}$  от координаты вдоль цепочек  $x$  медленная на масштабах  $Q^{-1}$ .

Параметр порядка  $\Delta$ , характеризующий ВЗП, вводится следующим образом

$$\Delta(\mathbf{r}_{\parallel}) = \int d^2\mathbf{r}'_{\parallel} dz dz' \varphi_Q(\mathbf{r}'_{\parallel}, z') g(\mathbf{r} - \mathbf{r}', z - z') W(z),$$

где  $g$  — потенциал электрон-фононного взаимодействия. В случае короткодействующего электрон-фононного взаимодействия учитывается зависимость  $g$  от импульса  $\mathbf{q}$  при малых импульсах

$$g(\mathbf{q}) \approx g_0 - g_2 (q_x^2 + q_y^2)$$

Термодинамическое среднее  $\Delta_0$  удовлетворяет уравнению, напоминающему самосогласованное уравнение для щели в теории БКШ.

$$1 = \lambda \int \frac{1}{\sqrt{\varepsilon^2 - |\Delta_0|^2}} \tanh \frac{\varepsilon}{2T} d\varepsilon,$$

где  $\lambda = \frac{g_0^2 \kappa}{4\pi v_F a_y}$ ,  $a_y$  — постоянная решётки в направлении, перпендикулярном вектору нестинга. Интеграл обрезается сверху на энергиях порядка  $\varepsilon_F$ , так что решение при  $T = 0$  имеет вид

$$\Delta = \varepsilon_F e^{-\lambda}.$$

Полученное выражение аналогично 3D случаю [8].

В отличие от 3D случая в 2D огромную роль играют флуктуации параметра порядка  $\Delta = |\Delta|e^{i\chi}$ . При этом поскольку амплитуда параметра порядка  $|\Delta|$  определяет щель в электронном спектре, то основной вклад будет от длинноволновых флуктуаций фазы параметра порядка, которые в пределе  $q \rightarrow 0$  не изменяют полную энергию. Таким образом, полагается, что амплитуда в каждой точке равна своему равновесному значению  $\Delta_0$ , и учитываются только флуктуации фазы параметра порядка  $\chi$ .

В случае невзаимодействующих друг с другом электронов корреляционная функция для фазы параметра порядка оказывается равной

$$\langle \chi(\mathbf{r}, t) \chi(\mathbf{r} + \delta\mathbf{r}, t) \rangle = \frac{\pi\lambda}{32v_F} \int \frac{d^2\mathbf{q}}{(2\pi)^2} \frac{e^{i(\mathbf{q}, \delta\mathbf{r})}}{\sqrt{v_x^2 k_x^2 + v_y^2 k_y^2}} \operatorname{cth} \frac{\sqrt{v_x^2 k_x^2 + v_y^2 k_y^2}}{2T},$$

где  $v_x \sim v_F$ ,  $v_y \sim s$ .

Хотя при нулевой температуре  $T = 0$  интеграл сходится, и корреляционная функция оказывается конечной, т.е. в системе существует дальний порядок, при сколь угодно малых положительных температурах при  $\delta\mathbf{r} = 0$  интеграл логарифмически расходится. Таким образом, в полном соответствии с общими термодинамическими соображениями дальний порядок нарушается. Однако, корреляционная функция для параметра порядка подчиняется медленному степенному закону

$$\langle \Delta^*(\mathbf{r}, t) \Delta(\mathbf{r} + \delta\mathbf{r}, t) \rangle = |\Delta_0|^2 e^{-([\chi(\delta\mathbf{r}, t) - \chi(0, t)] \chi(0, t))} = |\Delta_0|^2 (Q\delta r)^{-\gamma_0},$$

а не спадает экспоненциально. Это свидетельствует о том, что в системе наблюдается «псевдодальний» порядок, т.е. в случае образцов конечных размеров система может вести себя так, как если бы в ней был дальний порядок. Показатель экспоненты в системе без электрон-электронного взаимодействия оказывается равным

$$\gamma_0 = \frac{\lambda v_x T a_y}{8 v_F \hbar v_y} \sim \frac{T}{\Theta},$$

где  $\Theta$  — температура Дебая.

В присутствие кулоновского взаимодействия необходимо учитывать вклад в энергию, связанный с взаимодействием зарядов, индуцированных флуктуациями фазы. При заданной фазе  $\chi(\mathbf{r})$  индуцированная плотность заряда имеет вид

$$\delta\rho = -e \frac{\partial_x \chi}{\pi a_y}$$

Тогда вклад в энергию, связанный с кулоновским взаимодействием, записывается в виде

$$E_C = \int d\tau d^2\mathbf{r}_1 d^2\mathbf{r}_2 \delta\rho(\mathbf{r}_1) V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(\mathbf{r}_2),$$

где  $V(r)$  — потенциал электрон-электронного взаимодействия.

Рассмотрены три различных модели для  $V(r)$ :

1. Неэкранированный кулоновский потенциал
2. Кулоновский потенциал, экранированный свободными электронами в 3D;

3. Кулоновский потенциал, экранированный термически возбужденными электронами в 2D слое.

Первая из вышеперечисленных моделей рассмотрена в разделе «Неэкранированный кулоновский потенциал». Потенциал взаимодействия имеет вид

$$V(r) = \frac{1}{\epsilon r},$$

где  $\epsilon$  — эффективная диэлектрическая проницаемость среды. Если поверхность — граница между средами с диэлектрическими проницаемостями  $\epsilon_1$  и  $\epsilon_2$ , то  $\epsilon$  будет их средним арифметическим [9]

$$\epsilon = \frac{\epsilon_1 + \epsilon_2}{2}.$$

Корреляционная функция для флуктуаций фазы в фурье-представлении в главном порядке при  $q \rightarrow 0$  имеет в этом случае вид

$$\langle \chi(\omega, \mathbf{q}) \chi(-\omega, -\mathbf{q}) \rangle = \frac{\pi \lambda v_x^2 / (8v_F)}{\omega^2 + \frac{2\lambda e^2 v_x^2}{\epsilon a_y v_F} \frac{q_x^2}{\sqrt{q_x^2 + q_y^2}} + v_y q_y^2}$$

Сингулярность при  $q \rightarrow 0$  становится интегрируемой даже при  $T > 0$ , а значит средний квадрат флуктуаций фазы  $\langle \chi(\mathbf{r}, t) \chi(\mathbf{r}, t) \rangle$  конечный, и в системе существует дальний порядок.

В разделе «3D экранирование» рассматривается случай, когда потенциал межэлектронного взаимодействия заэкранирован свободными 3D электронами, находящимися вблизи поверхности, и имеет вид потенциала Юкавы

$$V(r) = \frac{1}{\epsilon r} \exp \left\{ -\frac{r}{r_D} \right\},$$

где  $r_D$  — радиус экранирования. При положительной температуре  $T > 0$  длинноволновые флуктуации приводят к исчезновению дальнего порядка и степенному закону спада корреляционной функции параметра порядка

$$\langle \Delta^*(0) \Delta(\mathbf{r}) \rangle = \Delta_0 \left( \frac{r}{r_D} \right)^{-\gamma_3}$$

$$\gamma_3 = \gamma_0 \sqrt{\frac{12\epsilon \lambda \hbar v_F}{e^2}} \sqrt{\frac{a_y}{r_D}}$$

Показатель для экранированного взаимодействия оказывается много меньше, чем показатель степени для корреляционной функций в невзаимодействующем случае  $\gamma_3 \ll \gamma_0$ . Это означает, что корреляционная функция спадает медленнее,

и в случае слабого экранирования, система ведёт себя, как если бы в ней был настоящий дальний порядок.

В разделе «2D экранирование» рассматривается случай, когда потенциал межэлектронного взаимодействия заэкранирован только электронами в проводящем 2D слое термически возбуждёнными через пайерлсовскую щель, и в фурье-представлении имеет вид

$$V(\mathbf{q}) = \frac{2\pi}{\epsilon \left( |q| + \frac{a_z}{r_D^2} \right)}$$

Плотность электронов, участвующих в экранировании, а значит и радиус экранирования экспоненциально зависят от температуры

$$r_D^2 \propto n_e^{-1} \propto e^{\Delta/T}$$

Корреляционная функция для параметра порядка опять подчиняется степенному закону, но с ещё меньшим показателем экспоненты

$$\langle \Delta^*(0) \Delta(\mathbf{r}) \rangle = \Delta_0 \left( \frac{r a_z}{r_D^2} \right)^{-\gamma_2} \quad (5)$$

$$\gamma_2 = \frac{\sqrt{\lambda}}{16\sqrt{3}} \frac{v_x T a_y}{v_y \hbar v_F} \sqrt{\frac{\epsilon \hbar v_F}{e^2}} \sqrt{\frac{a_y a_z}{r_D^2}} \quad (6)$$

Для показателей экспонент справедливо неравенство  $\gamma_2 \ll g_3 \ll \gamma_0$ , т.е. корреляционная функция спадает на больших расстояниях, чем в случае 3D экранирования и в случае без взаимодействия. И хотя, строго говоря, в системе нет дальнего порядка, в системах конечного размера из-за медленного спада корреляций можно говорить о псевдодальнем порядке.

**Третья глава** посвящена исследованию эффекта возникновения чисто спинового тока в электроде, подключённом туннельным образом к проводящему краю (поверхности) 2D (3D) топологического изолятора (ТИ). Подробно рассматривается влияние процессов, связанных с релаксацией в контактах, а для поверхностного состояния в 3D ТИ — с рассеянием электронов на примесях на конечный угол, которое в отличие от 2D случая не запрещено связью импульса и спина и влияет на электронный транспорт.

В разделе «Спиновый ток в 2D топологическом изоляторе» рассматривается краевое одномерное состояние 2D ТИ, подключённого туннельными контактами к объёмным металлическим электродам (рисунок 3). Изучаемый эффект можно наблюдать в разных реализациях — в этом разделе исследуется простейшая реализация с тремя контактами, один из которых заземлён, а к двум другим

симметричным образом приложено напряжение  $V$ . Длину заземлённого контакта обозначается  $l_0$ , и длины контактов с потенциалами  $V_{\pm} = \pm V/2$ , соответственно,  $l_1$  и  $l_2$ . Туннельные контакты учитываются с помощью туннельного гамильтониана, и предполагается, что туннелирование происходит между ближайшими точками и не сохраняет импульс, т.е. матричный элемент туннелирования имеет вид

$$\mathcal{T}(\vec{R}, x) = td\delta(X, x)\delta(\mathbf{R}_{\perp}),$$

где радиус-вектор  $\vec{R} = (X, Y, Z)$  относится к объёмному электроду, координата  $x$  — к краевому состоянию 2D ТИ. Дельта-функция  $\delta(\mathbf{R}_{\perp})$  выбирает усреднённое значение функции в поверхностном слое электрода толщиной  $d$  порядка межатомного расстояния. Выражение для матричного элемента записано таким образом, чтобы коэффициент  $t$ , определяющий интенсивность туннелирования, имел размерность энергии. Удобно ввести туннельную прозрачность контакта  $\Gamma = \pi\nu_3 d^3 |t|^2 \sim \frac{|t|^2}{\varepsilon_F}$ , где  $\nu_3 = \frac{mp_F}{2\pi^2\hbar^2}$  — 3D плотность состояний.

При помощи келдышевской техники выводится кинетическое уравнение для матричной функции распределения  $f$  размерности  $2 \times 2$  (индексы соответствуют проекции спина на ось  $z$ )

$$\sigma_z v_F \partial_x f = -\gamma(x) (f - f_i),$$

где  $\sigma_z$  — матрица Паули,  $\gamma = 2\Gamma/v_F$ ,  $f_i = f_0(\varepsilon - V_i)$  — фермиевская функция распределения в соответствующем электроде.

В пределе низких температур  $T \ll \hbar v_F/L$  вычисляется «дифференциальная спиновая проводимость», т.е. производная спинового тока, протекающего

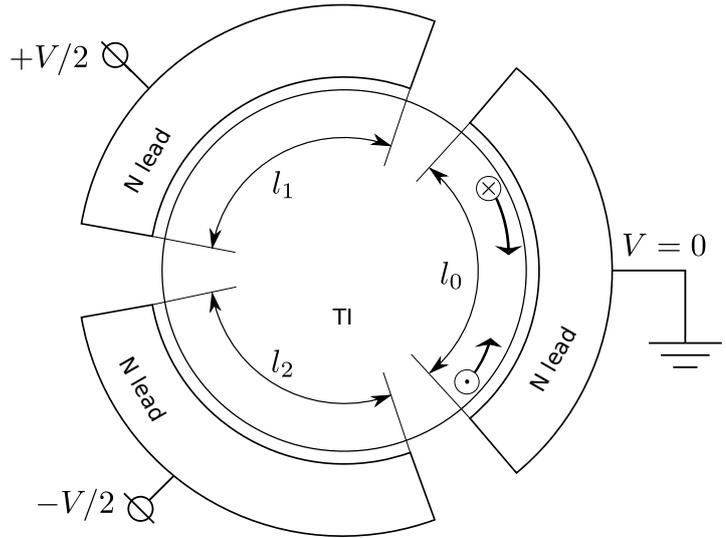


Рис. 3: Краевое состояние 2D ТИ с туннельными контактами

где  $\nu_3 = \frac{mp_F}{2\pi^2\hbar^2}$  — 3D плотность состояний.

через заземлённый электрод по приложенному напряжению

$$\frac{dJ_s}{dV} = \frac{G_0}{e} \frac{2 \sinh \frac{\gamma l_0}{2} \sinh \frac{\gamma l_1}{2} \sinh \frac{\gamma l_2}{2}}{1 + \alpha} \times \left[ \frac{1}{\cosh \frac{\gamma l}{2} - \cos \left( k_F L + \frac{eVL}{2\hbar v_F} \right)} + \frac{1}{\cosh \frac{\gamma l}{2} - \cos \left( k_F L - \frac{eVL}{2\hbar v_F} \right)} \right],$$

где  $G_0 = \frac{e^2}{h}$  — квант проводимости. Здесь и далее спиновый ток измеряется в единицах  $\frac{e^2}{2h}$ . Фактор  $\alpha = a \frac{e^2}{\epsilon \hbar v_F}$  связан с учётом локального сдвига химического потенциала, коэффициент  $a \sim 1$  зависит от точной геометрии,  $\epsilon$  — диэлектрическая проницаемость. В пределе высоких температур  $T > \hbar v_F / L$  осциллирующее подинтегральное выражение усредняется

$$\frac{dJ_s}{dV} = \frac{G_0}{e} \frac{2 \sinh \frac{\gamma l_0}{2} \sinh \frac{\gamma l_1}{2} \sinh \frac{\gamma l_2}{2}}{1 + \alpha} \frac{2}{\sinh \frac{\gamma l}{2}}$$

В пределе сильного затухания  $\gamma l_i \gg 1$  спиновый ток

$$I_s = \frac{G_0 V}{e(1 + \alpha)}$$

Также в диссертационной работе находится электрический ток, протекающий через заземлённый электрод. Дифференциальная проводимость оказывается равной

$$\frac{dI}{dV} = G_0 \frac{\sinh \frac{\gamma l_0}{2} \sinh \gamma l_1 \sin k_F L \sin \frac{eVL}{2\hbar v_F}}{\left[ \cosh \frac{\gamma l}{2} - \cos \left( k_F L + \frac{eVL}{2\hbar v_F} \right) \right] \left[ \cosh \frac{\gamma l}{2} - \cos \left( k_F L - \frac{eVL}{2\hbar v_F} \right) \right]}$$

Дифференциальная проводимость осциллирует при изменении напряжения и уровня Ферми, которым можно управлять, приложив напряжение к затвору. В случае высоких температур  $T > \frac{\hbar v_F}{L}$  или в пределе сильного затухания  $\gamma l_i \gg 1$  электрический ток обращается в нуль, и через электрод течёт чисто спиновый ток.

В разделе «Спиновый ток в 3D топологическом изоляторе» решается аналогичная задача о протекании спинового тока через электрод в системе 3D ТИ

с туннельными контактами. Рассматривается цилиндр из ТИ с проводящим поверхностным состоянием, который подключён тремя туннельными контактами к массивным металлическим электродам (рисунок 4). Как и в предыдущем разделе, один из электродов считается заземлённым, в то время как к двум другим симметричным образом подано напряжение  $V$ . Как и раньше,  $l_0$  обозначает длину туннельного контакта к заземлённому электроду, а  $l_1$  и  $l_2$  — длины контактов к электродам с потенциалом  $+V/2$  и  $-V/2$  соответственно. Предполагается, что между контактами есть зазор  $s$ . Также для простоты считается, что все контакты расположены в плоскости (111): тогда проводящее состояние ТИ описывается гамильтонианом

$$\hat{H}_{TI} = \int d^2\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) [(-iv_F \partial_{\mathbf{r}} \times \vec{e}_z \cdot \vec{\sigma}) - \varepsilon_F + V_{imp}(\mathbf{r})] \hat{\Psi}(\mathbf{r}),$$

в котором компоненты двухкомпонентного спинора  $\hat{\Psi}$  относятся к физическому спину, и матрицы Паули  $\vec{\sigma}$  совпадают с операторами электронного спина. Предполагается, что на поверхности ТИ есть примеси, потенциал которых описывается простой моделью случайного дельта-коррелированного потенциала

$$\overline{V_{imp}(\mathbf{r})V_{imp}(\mathbf{r}')} = u_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$

Здесь черта означает пространственное усреднение.

Туннельные контакты описываются с помощью туннельного гамильтониана, в котором в приближениях аналогичных сделанным в предыдущем разделе матричный элемент туннелирования имеет вид

$$\mathcal{T}(\vec{R}, \mathbf{r}) = t\sqrt{d}\delta(\mathbf{R}_{\parallel} - \mathbf{r})\delta(Z),$$

где  $t$  снова имеет размерность энергии.

С помощью келдышевской техники выводится кинетическое уравнение для функции распределения в ТИ

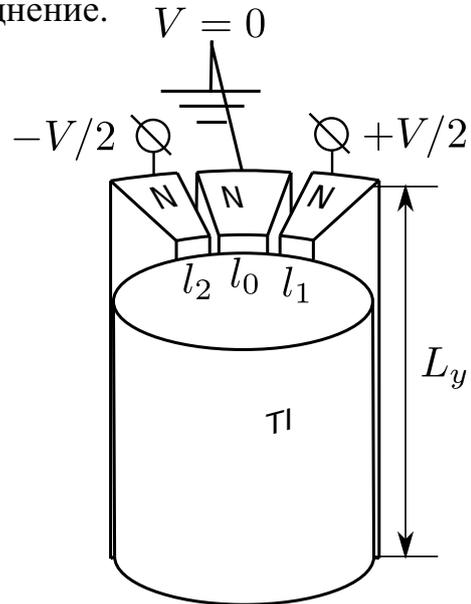


Рис. 4: Поверхностное состояние 3D ТИ с

$$v_F (n_x \partial_x + n_y \partial_y) f = - \frac{f - \langle f \rangle - n_x \langle n_x f \rangle - n_y \langle f n_y \rangle}{\tau} - 2\Gamma(f - f_i), \quad (7)$$

где  $\tau = (\pi\nu_2 u_0^2)$  — время рассеяния импульса на примесях,  $\nu_2 = p_F / (2\pi\hbar^2 v_F)$  — 2D плотность состояний,  $f_i$  — функция распределения в соответствующем электроде. Первое слагаемое в правой части описывает рассеяние импульса на примесях, второе — туннелирование. Из кинетического уравнения (7) выводится

уравнение непрерывности с источником, описывающим туннелирование и выражение для плотности электрического тока  $j_x$  вдоль оси  $x$ :

$$\begin{aligned}\partial_x j_x &= 2\Gamma(x) [\rho - \nu_2(\mu - V_i)] \\ j_x &= \sigma E + D\partial_x \rho,\end{aligned}$$

где коэффициент диффузии  $D = \frac{v_F^2}{\tau^{-1} + 4\Gamma}$ , проводимость  $\sigma = \frac{e^2 v_F p_F}{2\pi (\tau^{-1} + 4\Gamma)}$ .

Аналогично находится уравнение непрерывности для спина в заземлённом электроде

$$\partial_t \rho_s^{(lead)} + \text{div} j_s^{lead} = \frac{\nu_2}{\nu_3} \Gamma(x) \delta(z) \rho_s^{(lead)} + \frac{2}{v_F} \Gamma(x) j_e^{(TI)}(x, y) \delta(Z),$$

где  $j_e^{(TI)}$  — плотность электрического тока в ТИ,  $\rho_s^{(lead)}$  и  $j_s^{(lead)}$  — плотность спина и спинового тока в электроде. Также выводится выражение для спинового тока в электроде

$$J_s = \frac{1}{v_F} \int 2\Gamma j_e^{(TI)} dx dy$$

В результате решения кинетического уравнения (7) оказывается, что спиновый ток, протекающий через заземлённый электрод связан с приложенным напряжением соотношением

$$J_s = \frac{G_0}{e(1+\alpha)} k_F L_y \frac{1}{\left[4 + (\Gamma\tau)^{-1}\right] (1 + sl_D)} eV,$$

где  $s$  — зазор между контактами,  $l_D = \sqrt{\frac{D}{8\Gamma}}$  — диффузионная длина. Электрический ток, протекающий через заземлённый электрод, оказывается равным нулю, т.е. ток в заземлённом электроде чисто спиновый.

Множитель  $1 + \alpha$ , как и в предыдущем разделе, связан с учётом локального сдвига химического потенциала.

**В заключении** приведены основные результаты диссертационной работы.

## Список публикаций

- [A1] Артеменко С. Н., Асеев П. П., Шапиро Д. С. Электронный транспорт в коррелированном квантовом проводе с объёмными контактами // Письма в ЖЭТФ. 2010. Т. 91, № 11. с. 659–663.
- [A2] Асеев П. П. Электронный транспорт в коррелированном квантовом проводнике с объёмными контактами // Радиотехника и электроника. 2011. Т. 56. с. 1227–1236.
- [A3] Aseev P. P., Artemenko S. N. Spin injection from topological insulator tunnel-coupled to metallic leads // Письма в ЖЭТФ. 2013. Т. 98, № 5. с. 323–326.
- [A4] Aseev P. P., Artemenko S. N. Stabilization of the surface CDW order parameter by long-range Coulomb interaction // Physica B: Condensed Matter. 2012. Т. 407, № 11. с. 1835–1838.

## Цитированная литература

1. Giamarchi T. Quantum Physics in One Dimension. Clarendon press, 2003.
2. Voit J. One-Dimensional Fermi liquids // Rep. Prog. Phys. 2007. Т. 58. с. 977.
3. Egger R., Grabert H. Applying voltage sources to a Luttinger liquid with arbitrary transmission // Phys. Rev. B. 1998. Т. 58. с. 10761.
4. Egger R., Grabert H. Voltage-biased quantum wire with impurities // Phys. Rev. Lett. 1996. Т. 77, № 3. с. 538–541.
5. Observation of an extraordinary antiferromagnetic transition on the NiO (100) surface by metastable helium atom diffraction / M. Marynowski, W. Franzen, M. El-Batanouny [и др.] // Phys. Rev. B. 1999. Т. 60, № 8. с. 6053.
6. Surface Charge Density Wave Phase Transition in NbSe<sub>3</sub> / C. Brun, Z.-Z. Wang, P. Monceau [и др.] // Phys. Rev. Lett. 2010. Т. 104, № 25. с. 256403.
7. Larkin A., Varlamov A. Theory of Fluctuations in Superconductors. International Series of Monographs on Physics. OUP Oxford, 2005.
8. Artemenko S. N., Volkov A. F. Transport phenomena in CDW conductors, microscopic approach // Charge density waves in solids / под ред. Gor'kov L. P., Grüner G. Elsevier Science Publishing, Amsterdam, 1989. с. 365–402.
9. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. М.: Наука, 1982. Т. 8. Электродинамика сплошных сред.