

На правах рукописи



Еналдиев Владимир Викторович

**Свойства краевых и поверхностных состояний в
дираковских материалах**

01.04.10 – Физика полупроводников

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва – 2017

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), г.Москва.

Научный руководитель: **Волков Владимир Александрович**,
доктор физико-математических наук

Официальные оппоненты: **Энтин Матвей Вульфович**
доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории новых элементов наноэлектроники отдела прикладных наноэлектронных структур ФГБУН Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН

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

Ведущая организация: Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования "Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского"

Защита состоится 2-го июня 2017 г. в 12:00 на заседании диссертационного совета Д.002.231.01 на базе ФГБУН Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН (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 и на сайте <http://www.cplire.ru/rus/dissertations/Enaldiev/index.html>

Автореферат разослан "___" _____ 2017 г.

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

 — Кузнецова
Ирен Евгеньевна

Общая характеристика работы

Актуальность темы исследования. Базовым элементом в современных электронных устройствах является полевой транзистор, каналом которого служит двумерный электронный газ, образующийся за счет изгиба зон в структуре металл-диэлектрик-полупроводник [1]. В настоящее время технологический прогресс привел к возможности создания и исследования физических свойств двумерного электронного газа с необычным дираковским законом дисперсии электронов, возникающим в ряде атомно тонких кристаллов и на поверхности трехмерных полупроводниковых кристаллов. Первым полученным в лаборатории кристаллом толщиной в один атом стал графен [2], который состоит из атомов углерода, расположенных в узлах гексагональной решетки. Главным отличительным свойством графена является ультрарелятивистский закон дисперсии носителей заряда, называемых также безмассовыми дираковскими фермионами. Существование безмассовых дираковских фермионов обуславливает необычные свойства графена (например, возможность наблюдения квантового эффекта Холла при комнатной температуре). С точки зрения применения графена в качестве материала в современных устройствах электроники и оптоэлектроники важно исследовать не только "объемные" свойства носителей заряда, но и свойства краевых/поверхностных состояний, возникающих из-за обрыва кристаллической решетки [3, 4]. Последние образуют дополнительный проводящий канал вблизи края графена [5] и влияют на транспортные и оптические свойства графеновых структур. Проявление вклада краевых состояний в оптическом поглощении графена с нанотверстиями изложено в отдельной главе настоящей диссертации.

Одновременно с исследованием графена возникла топологическая классификация полупроводниковых кристаллов [6]. В рамках этой теории классификация зон проводится согласно симметрии обращения времени и вводится

понятие топологического инварианта – числа, принимающего два значения (0 или 1) и характеризующего объёмную зонную структуру полупроводника. Топологическими изоляторами (ТИ) называются полупроводники, для которых топологический инвариант равен 1 [7, 8]. Главным свойством ТИ является существование в запрещенной зоне материала топологически защищенных проводящих поверхностных состояний (ПС). К ТИ относят материалы Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , $\text{Bi}_x\text{Pb}_{1-x}$ (при $0.19 < x < 0.33$), в которых объёмные носители имеют дираковский (или модифицированный дираковский) закон дисперсии с ненулевой массой (шириной запрещенной зоны). В рамках метода огибающих функций для описания поверхностных состояний в ТИ используется нулевое граничное условие (ГУ) [9], которое гарантирует существование безмассовых дираковских фермионов на поверхности ТИ. Хотя интуитивно накладываемое нулевое ГУ является приемлемым, оно не может описать зависимость свойств ПС от возмущения кристаллического потенциала вблизи поверхности ТИ. Одна из глав диссертации содержит исследование зависимостей спектров ТИ от свойств поверхности в рамках феноменологического ГУ.

Помимо ТИ существуют топологические кристаллические изоляторы, существование ПС в которых защищено пространственной симметрией. К топологическим кристаллическим изоляторам относят сплавы $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x(\text{Se}, \text{Te})$. Объёмные носители в этих материалах также обладают дираковской дисперсией. Интересной особенностью указанных сплавов является существование ПС как при нормальном так и инвертированном порядке зон [10, 11]. В настоящей диссертации будет показано, что это естественно описывается в рамках уравнения Дирака, причем ПС в неинвертированной фазе приводят к эффектам похожим на те, что возникают из-за существования топологических ПС. Из вышеуказанного следует актуальность темы диссертационной работы.

Цели и задачи диссертационной работы: Построение теории по-

поверхностных состояний в нанопроволоках дираковских материалов типа Bi , $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ и $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x(\text{Se}, \text{Te})$. Доказательство того, что нетопологические поверхностные состояния также дают ааронов-бомовский вклад в магнитопроводимость нанопроволоки. Исследование зависимости энергетического спектра поверхностных состояний от феноменологических граничных условий в топологических изоляторах типа $\text{Bi}_2(\text{Se}, \text{Te})_3$ в рамках $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -приближения, а также двумерных топологических изоляторах в приближении сильной связи. Расчет вклада краевых состояний, локализованных на нанотверстиях, в поглощение наноперфорированного графена.

Для достижения поставленных целей были решены следующие задачи:

1. Нахождение энергетического спектра трехмерного изотропного уравнения Дирака в нанопроволоке без магнитного поля и в продольном магнитном поле. Вычисление вклада поверхностных состояний в магнитопроводимость нанопроволоки, при заполнении большого числа поверхностных подзон.
2. Вывод граничного условия для огибающих функций в трехмерных топологических изоляторах типа $\text{Bi}_2(\text{Se}, \text{Te})_3$ на поверхности (111). Изучение зависимости энергетического спектра поверхностных состояний от значений параметров в выведенном граничном условии.
3. Вывод граничного условия для волновых функций в двумерных топологических изоляторах в рамках метода сильной связи с четырьмя орбиталями на каждом узле квадратной решетки. Исследование зависимости энергетических спектров краевых состояний по всей краевой зоне Бриллюэна от значений феноменологических параметров в выведенном ГУ.
4. Вычисление вклада внутризонных переходов в поглощение наноперфорированного графена.

Научная новизна работы. В диссертации впервые найден энергетический вклад

ческий спектр трехмерного уравнение Дирака с граничным условием, удовлетворяющим симметрии по отношению к инверсии времени и эрмитовости задачи, в геометрии нанопроволоки.

Предложено новое теоретическое описание ПС в 3D ТИ типа $\text{Bi}_2(\text{Se},\text{Te})_3$, учитывающее пространственную симметрию поверхности (111). Рассмотрено влияние общего ГУ, инвариантного относительно инверсии времени, на спектр краевых состояний в 2D ТИ.

Предсказан новый механизм резонансного поглощения терагерцового излучения в наноперфорированном графене.

Практическая значимость. Предсказано, что наноперфорированный графен перспективен в качестве оптического модулятора терагерцового излучения.

Положения, выносимые на защиту:

1. Рассмотрен вклад нетопологических поверхностных состояний, образующих одномерные подзоны вне запрещенной зоны материала, в транспорт вдоль нанопроволок из дираковских кристаллов типа Bi , $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$, $\text{Pb}_x\text{Sn}_{1-x}(\text{Se},\text{Te})$. Включение продольного магнитного поля приводит к появлению осциллирующей ааронов-бомовской поправки к плотности поверхностных состояний и магнитопроводимости нанопроволоки.
2. В рамках приближения огибающих функций предложено общее граничное условие для 3D ТИ типа $\text{Bi}_2(\text{Se},\text{Te})_3$, удовлетворяющее общим физическим требованиям. Учет пространственных симметрий поверхности (111) кристаллов типа $\text{Bi}_2(\text{Se},\text{Te})_3$ позволяет уменьшить число неизвестных граничных параметров до трёх. Показано, что энергетический спектр топологических поверхностных состояний сильно зависит от значений граничных параметров и в общем случае не имеет стандартного конического вида.

3. В 2D ТИ, описываемых моделью сильной связи с четырьмя орбиталями на каждом узле двумерной квадратной решетки, общее граничное условие, инвариантное относительно обращения времени, не нарушает соответствие "объем-граница".
4. Предсказано, что коэффициент поглощения наноперфорированного графена имеет резонанс на частотах, соответствующих расстоянию между ближайшими уровнями энергий краевых состояний, локализованных вблизи каждого наноотверстия. Величиной коэффициента поглощения на резонансной частоте можно управлять при помощи напряжения на затворе.

Степень достоверности и апробация результатов. Достоверность представленных в диссертации результатов подтверждается тем, что при расчётах использовались проверенные методы теоретической физики, воспроизводящие результаты в предельных случаях и, дающих непротиворечивые результаты в различных подходах. Полученные теоретические результаты признаны научной общественностью при обсуждениях на российских и международных научных конференциях, а также подтверждены положительными рецензиями опубликованных статей в научных журналах.

Результаты исследований, вошедших в диссертацию, докладывались на Joint Conference of New Trends on Topological Insulators and 17-th International Conference on Narrow Gap Systems (Würzburg, Germany, July 25-29, 2016), Graphene Week 2016 (Warsaw, Poland, June 13-17, 2016), 18th and 22th International Symposium "Nanostructures: Physics and Technology" (Saint Petersburg, Russia, June 21-26, 2010, and Saint Petersburg, Russia, June 23-27, 2014); 10-ой и 12-ой Российской конференции по физике полупроводников (Нижний Новгород 19-23 сентября 2011 г., и Ершово 21-25 сентября 2015 г.); 18-ом международном симпозиуме "Нанопизика и нанопотоника" (Нижний Новгород, 10-14 марта 2014 г.); XIII Конференция молодых ученых "Пробле-

мы физики твердого тела и высоких давлений” (Сочи, 10-21 сентября 2014); 9-th Advanced Research Workshop Fundamentals of Electronic Nanosystems “NanoPeter 2014” (Saint Petersburg, Russia, June 21-27, 2014); International Workshop “New Trends in Topological Insulators” (Berlin, Germany, 7-11 July 2014); 15-ой Школы молодых ученых “Актуальные проблемы физики” Физический институт РАН, Москва, 16-20 ноября 2014 г.

Публикации. Материалы диссертации опубликованы в 13 печатных работах, из них 5 статей в рецензируемых журналах, входящих в систему Web of Science [A1, A2, A3, A4, A5], а также 8 публикаций в сборниках трудов и тезисов конференций [A6, A7, A8, A9, A10, A11, A12, A13].

Личный вклад автора. Автор принимал участие в постановке задач и обсуждении результатов. Все расчеты проводились автором.

Структура диссертации. Диссертация состоит из введения, обзора литературы, 3-х глав, заключения, библиографии и 2-ух приложений. Работа содержит 90 страниц, включая 22 рисунка, 4 таблицы и список литературы из 111 источников.

Содержание работы

Во **Введении** обоснована актуальность диссертационной работы, сформулированы цели, научная новизна и практическая значимость работы, представлены научные положения, выносимые на защиту. Затем следует **Обзор литературы**, который состоит из трёх разделов. В первом разделе вводится понятие топологического (кристаллического) изолятора и обзревается проблема граничных условий для огибающих функций трехмерных топологических изоляторов типа $\text{Bi}_2(\text{Se}, \text{Te})_3$, $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ и топологических кристаллических изоляторов типа $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x(\text{Se}, \text{Te})$. Второй раздел посвящен изложению известных теоретических и экспериментальных результатов по эффекту

Аронова-Бома в нанопроволоках из топологических изоляторов. В третьем разделе приводятся результаты работ по краевым состояниям в графене в модели сильной связи и в приближении огибающих функций и их связи с экспериментальными работами.

Первая глава посвящена проблеме поверхностных состояний в полупроводниках типа $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x(\text{Se}, \text{Te})$ и $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ на полупространстве, а также энергетическому спектру массивных дираковских фермионов в нанопроволоке и вкладу поверхностных подзон в магнитопроводимость.

В разделе **1.1** с использованием симметричных соображений выводится эффективный двухзонный $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -гамильтониан, описывающий электроны в L долинах $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x(\text{Se}, \text{Te})$ и $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$, который приводится к виду анизотропного гамильтониана Дирака:

$$H_D = m\tau_z \otimes \sigma_0 + \tau_x \otimes (v_1\sigma_x p_x + v_2\sigma_y p_y + v_3\sigma_z p_z), \quad (1)$$

где $v_{1,2,3}$ -матричные элементы оператора импульса, $\boldsymbol{\sigma}$, $\boldsymbol{\tau}$ -вектора матриц Паули, \mathbf{p} -квазиимпульс, отсчитанный от L точки.

В разделе **1.2**, используя эрмитовость и инвариантность относительно инверсии времени, для анизотропного уравнения Дирака с гамильтонианом (1) выведено граничное условие (ГУ) общего вида:

$$\left[\Psi_v - ia_0 \left(n_x \sigma_x + \frac{v_2}{v_1} n_y \sigma_y + \frac{v_3}{v_1} n_z \sigma_z \right) \Psi_c \right]_S = 0, \quad (2)$$

где $\Psi_{v,c}$ – огибающие функции электронов в валентной зоне и зоне проводимости, $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$ – единичный вектор нормали к поверхности S , a_0 – действительный феноменологический параметр, описывающий свойства поверхности. По сути ГУ (2) является обобщением ГУ, выведенного в работе [12], для изотропного уравнения Дирака.

В этом же разделе получен энергетический спектр поверхностных состояний (ПС) на полупространстве, описываемом анизотропным уравнением

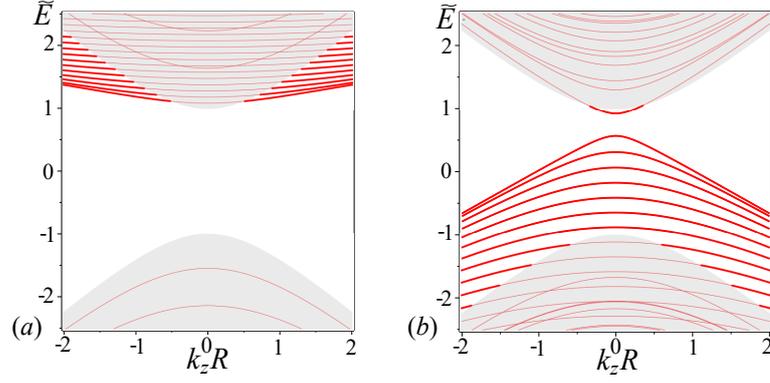


Рис. 1. Энергетический спектр ($\tilde{E} = ER/\hbar v$) массивных дираковских фермионов в нанопроволоке при (a) $a_0 = -0.1$, (b) $a_0 = 0.4$. Жирные линии отвечают подзонам поверхностных состояний, серым цветом закрашена область размерно-квантованных подзон.

Дирака с ГУ (2):

$$E = s \frac{2\tilde{a}_0}{1 + \tilde{a}_0^2} \sqrt{v_1^2 p_x^2 + v_2^2 p_y^2} + m \frac{1 - \tilde{a}_0^2}{1 + \tilde{a}_0^2},$$

при условии $2m\tilde{a}_0 - s(1 - \tilde{a}_0^2) \sqrt{v_1^2 p_x^2 + v_2^2 p_y^2} \geq 0$, (3)

здесь $\tilde{a}_0 = a_0 v_3 / v_1$, $s = \pm 1$ – собственное число оператора киральности $\tau_z \otimes (v_1 \sigma_x p_x + v_2 \sigma_y p_y) / \sqrt{v_1^2 p_x^2 + v_2^2 p_y^2}$. В изотропном случае $v_1 = v_2 = v_3 = v$ формула (3) переходит в известный спектр ПС [12].

В разделе **1.3** вычисляется спектр изотропного уравнения Дирака с ГУ (2) при $v_1 = v_2 = v_3 \equiv v$ в геометрии цилиндрической нанопроволоки радиуса R . В отсутствие магнитного поля спектр размерно-квантованных и поверхностных подзон определяется дисперсионным уравнением (см.рис.1):

$$a_0 \hbar v k \left[\frac{J_{j-1/2}(kR)}{J_{j+1/2}(kR)} - \frac{J_{j+1/2}(kR)}{J_{j-1/2}(kR)} \right] = (a_0^2 - 1) E + (a_0^2 + 1) m, \quad (4)$$

в котором $k = \sqrt{E^2 - m^2 - (\hbar v k_z)^2} / \hbar v$, k_z – волновой вектор вдоль оси проволоки, $j = \pm 1/2, 3/2, \dots$ – сохраняющаяся проекция полного углового момента на ось проволоки, $J_{j \mp 1/2}(z)$ – функция Бесселя 1-го рода. В пределе $k_z R \rightarrow \infty$ спектр размерно-квантованных подзон выходит на асимптоты:

$$E = \pm \hbar v \sqrt{m^2 / \hbar^2 v^2 + k_z^2 + \gamma_{j \pm 1/2, n}^2 / R^2}, \text{ где } \gamma_{j \pm 1/2, n} \text{ – это } n\text{-ый нуль функции}$$

Бесселя первого рода $J_{j\pm 1/2}$. Энергетический спектр ПС имеет вид:

$$E = sv_s\hbar\sqrt{k_z^2 + \frac{j^2}{R^2}} + E_0, \text{ при условии } \kappa = \frac{m}{v\hbar} - s\frac{E_0}{m}\sqrt{k_z^2 + \frac{j^2}{R^2}} \geq 0, \quad (5)$$

и в пределе прижатости ПС к поверхности проволоки (т.е. $\kappa R \gg j^2$, κ^{-1} –глубина затухания ПС по радиусу). В предыдущей формуле $v_s = 2|a_0|v/(1 + a_0^2)$, $E_0 = m(1 - a_0^2)/(1 + a_0^2)$.

Далее в разделе **1.3** анализируется влияние продольного магнитного поля на энергетический спектр массивных дираковских фермионов. В магнитном поле появляются три типа подзон. Первый тип – подзоны уровней Ландау, спектр которых определяется соотношением: $E = \pm[\hbar v/\lambda]\sqrt{2n_r + (k_z\lambda)^2 + (m\lambda)^2}$, где $n_r = 0, 1, 2, \dots$ –радиальное квантовое число, $\lambda^2 = hc/eB$ – квадрат магнитной длины. Подзоны уровней Ландау появляются в достаточно сильных магнитных полях $R/\lambda \gg 1$. Ко второму типу относятся подзоны скачущих орбит. Третий тип – поверхностные подзоны, асимптота спектра которых определяется формулой:

$$E_{k_z j s} = s\hbar v_s\sqrt{k_z^2 + \frac{(j + \Phi - \gamma_B)^2}{R^2}} + E_0, \quad (6)$$

в которой $\Phi = \pi eBR^2/hc$ – количество квантов магнитного потока, пронизывающих сечение квантовой проволоки, $\gamma_B = 0$ в квазиклассическом пределе $|\kappa R/j| \gg \max(|j|, \Phi)$ (слабые магнитные поля и сильная прижатость ПС к поверхности), $\gamma_B = 1/2$ в пределе сильных магнитных полей $\Phi \gg |j - 1/2|$, $\Phi \gg \lambda^2 k^2/2$.

Вдали от конической точки E_0 ($(E - E_0)R/\hbar v \equiv pR \gg 1$) плотность поверхностных состояний, описываемых формулой (6), имеет вид :

$$\rho(E) = \rho_0 \left[1 + 2\sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{\cos(2\pi pRn - \frac{\pi}{4}) \cos(2\pi n(\Phi - \frac{1}{2} - \gamma_B))}{\sqrt{2\pi pRn}} \right] \times \\ \times \Theta[(E - E_0) \operatorname{sgn}(a_0(a_0^2 - 1)) + \hbar v k_e], \quad (7)$$

здесь $\rho_0 = (E - E_0)/2\pi(\hbar v)^2$ –плотность безмассовых дираковских фермионов, $\Theta[\dots]$ – функция Хевисайда, которая определяет область энергий, в которой

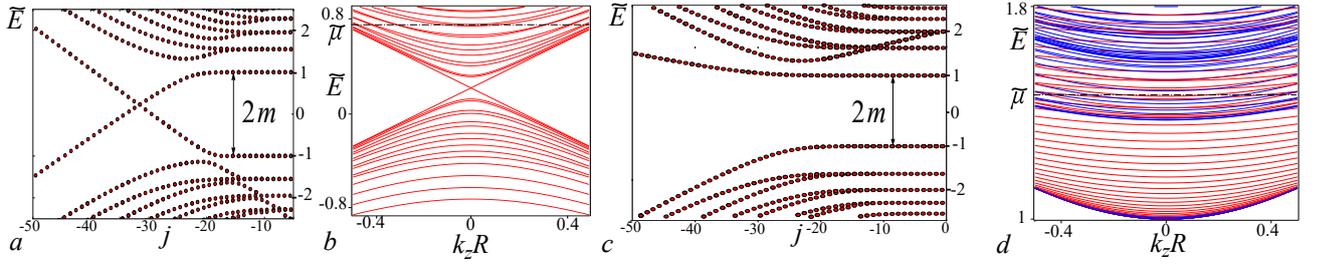


Рис. 2. Энергетический спектр массивных дираковских фермионов в нанопроволоке в продольном магнитном поле для двух типов значений граничного параметра a_0 : a, c) Обезразмеренные спектры $\tilde{E} = ER/\hbar v$ одномерных подзон как функции подного углового момента j при $a_0 = 0.8$ (a) и $a_0 = -0.2$ (c). b, d) Спектры одномерных подзон: (b) при $a_0 = 0.8$; (d) при $a_0 = -0.2$. Для вычислений использовались следующие параметры $\hbar c/\lambda = 0.896m$, $\Phi/\Phi_0 = 35$. Штрих-пунктирная линия на рисунках (b) и (d) обозначает уровень Ферми $\tilde{\mu}$.

существуют ПС, $k_e = 2|a_0|m/\hbar c|1 - a_0^2|$. Из формулы (7) следует, что плотность ПС является осциллирующей функцией магнитного потока Φ как при $a_0 > 0$ (когда подзоны ПС образуются в запрещенной зоне рис.2а, b), так и при $a_0 < 0$ (когда энергии поверхностных подзон лежат вне запрещенной зоны рис.2с, d)

В разделе **1.4** вычисляется вклад ПС в магнитопроводимость при рассеянии на слабом примесном потенциале $V(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N u(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ где $u(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) = U\delta(r - r_i)\delta(\theta - \theta_i)\delta(z - z_i)/r_i$ в пределе заполнения большого числа подзон ПС и низких температур $T < \hbar v/R$. В рассматриваемом пределе поправку к магнитопроводимости, связанную с рассеянием между ПС можно представить в виде:

$$\delta\sigma = \sigma_{2D}2\pi R \left[c_1 - c_2 \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{\cos(2\pi QRn - \frac{\pi}{4}) \cos(2\pi n(\Phi - \frac{1}{2} - \gamma_B))}{\sqrt{2\pi QRn}} \right] \times \Theta[(\mu - E_0) \text{sgn}(a_0(a_0^2 - 1)) + \hbar vk_e], \quad (8)$$

где $c_1 \approx 0.95$, $c_2 \approx 10.6$, $\sigma_{2D} = e^2 v^2 \hbar R / \pi n_{imp} U^2 \kappa$ - друдевская проводимость двумерных безмассовых дираковских фермионов, $Q = (\mu - E_0)/\hbar v$ - волновой вектор на уровне Ферми. Формула (8) применима, когда член с суммой

является малой осциллирующей поправкой к первому члену. Осцилляции Ааронова-Бома магнитопроводимости с периодом $\Delta\Phi = 1$ возникают за счет расходимости суммы в (8) при целых $QR \pm (\Phi - 1/2 - \gamma_B)$, которая появляется из-за корневой расходимости плотности ПС (7) вблизи дна каждой из подзон.

Вторая глава посвящена вопросам спектра ПС и ГУ в 3D и 2D ТИ. В двухзонном приближении $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -гамильтониан 3D ТИ типа $\text{Bi}_2(\text{Se},\text{Te})_3$ вблизи Γ точки имеет вид:

$$H_{3D} = (m + b\mathbf{k}^2) \tau_z \otimes \sigma_0 + v\tau_x \otimes (\boldsymbol{\sigma}\mathbf{k}), \quad (9)$$

где m —полуширина запрещенной зоны, b —параметр описывающий вклад удаленных зон, v —матричный элемент оператора импульса.

В разделе **2.1** выведено общее ГУ для огибающих функций, удовлетворяющих уравнению $H_{3D}\Psi = E\Psi$ в ограниченном поверхностью S пространстве: $[(b/v)\partial_n\Psi - Q\Psi]_S = 0$. В ГУ для симметричной поверхности (111) матрица Q размерности 4×4 определяется формулой:

$$Q = \begin{pmatrix} q_1 & i(q_2 + \frac{1}{2}) & 0 & 0 \\ i(q_2 - \frac{1}{2}) & q_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & q_1 & -i(q_2 + \frac{1}{2}) \\ 0 & 0 & -i(q_2 - \frac{1}{2}) & q_3 \end{pmatrix}, \quad (10)$$

в которой $q_{1,2,3}$ —безразмерные действительные феноменологические параметры, описывающие свойства поверхности. Величины граничных параметров существенно влияют на спектр ПС, рис.3а. В общем случае на поверхности ТИ не следует ожидать появления безмассовых дираковских фермионов. При некоторых значениях параметров $q_{1,2,3}$ ПС могут исчезать из запрещенной зоны в окрестности Γ точки.

В разделе **2.2** исследуется зависимость спектров краевых состояний в 2D ТИ в модели сильной связи из работы [13]. Из условия зануления нор-

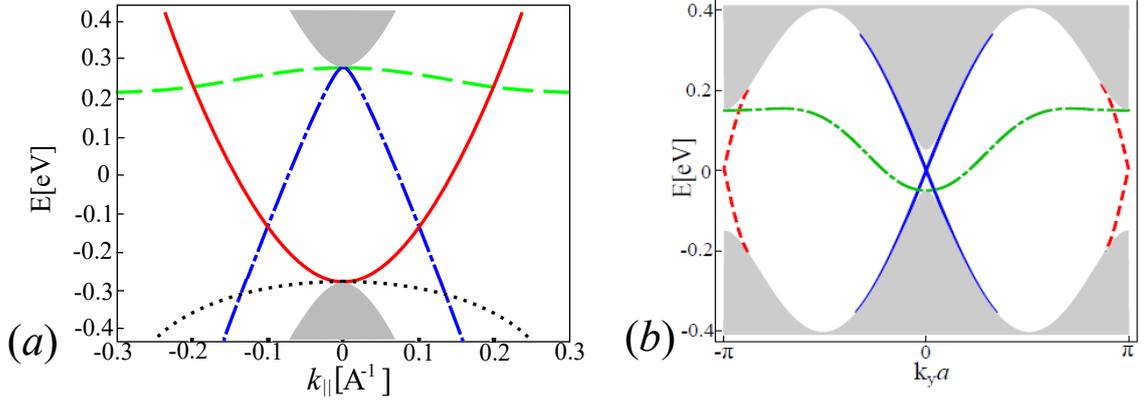


Рис. 3. (a) Спектры ПС вблизи Γ точки 3D ТИ типа $\text{Bi}_2(\text{Se}, \text{Te})_3$ при $q_2 = 0.5$, $q_3 = -q_1$, и четырех значениях q_1 : $q_1 = -1.27$ (пунктирная линия), $q_1 = 0.79$ (штрих-пунктирная линия), $q_1 = 0$ (сплошная линия), $q_1 = 0.44$ (точечная линия). Объемные параметры равны $m = -0.28 \text{эВ}$, $v = 4 \text{эВ} \cdot \text{А}$, $b = 6.86 \text{эВ} \cdot \text{А}^2$. (b) Спектр краевых состояний в модели сильной связи 2D ТИ [13] для трех наборов граничных параметров $g_1 = \infty, g_2 = g_3 = 0, g_4 = \infty$ (сплошная линия), $g_1 = 0.1, g_2 = 0.5, g_3 = g_4 = 0$ (пунктирная линия), $g_1 = -0.05, g_2 = g_3 = 0, g_4 = \infty$ (штрих-пунктирная линия).

мальной компоненты тока вероятности для линейного края вдоль оси y выведено общее ГУ для четырехкомпонентной волновой функции Ψ_{x_i, y_i} :

$$[-ib\sigma_0 \otimes \tau_z + (v/2)(\sigma_z \otimes \tau_y)] \Psi_{1, y_i} = G \Psi_{0, y_i}, \quad (11)$$

в котором матрица G задается формулой:

$$G = i \begin{pmatrix} g_1 & g_2 & 0 & g_3 \\ g_2 & g_4 & g_3 & 0 \\ 0 & g_3 & g_1 & -g_2 \\ g_3 & 0 & -g_2 & g_4 \end{pmatrix} \quad (12)$$

где $g_{1,2,3,4}$ действительные феноменологические параметры, описывающие свойства края. Параметр g_3 описывает краевое спин-орбитальное взаимодействие. Форма спектра краевых состояний и область квазиимпульсов, в которой последние пересекают запрещенную зону, определяется параметрами матрицы

G (12) (см. рис.3b). ГУ (11) не нарушает соответствие "объем-граница", поскольку уровень Ферми всегда пересекает одну пару краевых состояний, связанных инверсией времени.

В **третьей главе** исследуется вклад краевых состояний в поглощение наноперфорированного графена. В приближении огибающих функций электроны в графене описываются уравнением Вейля:

$$v\sigma\mathbf{r}\psi_\tau = \varepsilon\psi_\tau, \quad (13)$$

где $v \approx 10^6$ м/с, $\tau = 1(-1)$ -индекс долины $K(K')$, $\psi_\tau = (\psi_{1\tau}, \psi_{2\tau})^T$ – двухкомпонентная огибающая функция.

В разделе **3.1** вычисляется спектр краевых состояний, локализованных вблизи края одного круглого наноотверстия радиуса R в графене. Наноотверстия описываются внутридолинным ГУ: $[\psi_{1\tau} + i\tau a^\tau e^{i\varphi}\psi_{2\tau}]_R = 0$, с усредненным по периметру значением феноменологического параметра a . В низкоэнергетическом пределе $\varepsilon R/\hbar v \ll 1$ краевые состояния обладают квазиэквидистантным спектром:

$$\varepsilon_{j,\tau} = \tau \left(j - \frac{1}{2} \right) (\text{sgn}(a)\hbar\omega_0 - \Delta_j) - i\gamma_j, \quad (14)$$

здесь эквидистантная часть спектра определяется частотой $\omega_0 = 2|a|v/R$, малая неэквидистантная поправка

$$\Delta_j = \frac{\hbar v}{R} \frac{2a^3(j - 1/2) [1 - (j - 1/2)\delta_{|j|,3/2}]}{(j - 3/2)}, \quad (15)$$

где $\delta_{|j|,3/2}$ – символ Кронеккера. Малое, но конечное обратное время жизни краевых состояний равно

$$\gamma_j = \frac{2\pi\hbar v}{R} \frac{(|a(j - 1/2)|)^{2|j-1/2|+1}}{\Gamma(|j - 1/2|)\Gamma(|j - 1/2| + 1)}, \quad (16)$$

где $\Gamma(x)$ –гамма-функция. Применимость спектра (14) определяется условиями $|a(j - 1/2)| \ll 1$; $\tau(j - 1/2) > 0$; $|j| = 3/2, 5/2, 7/2, \dots$

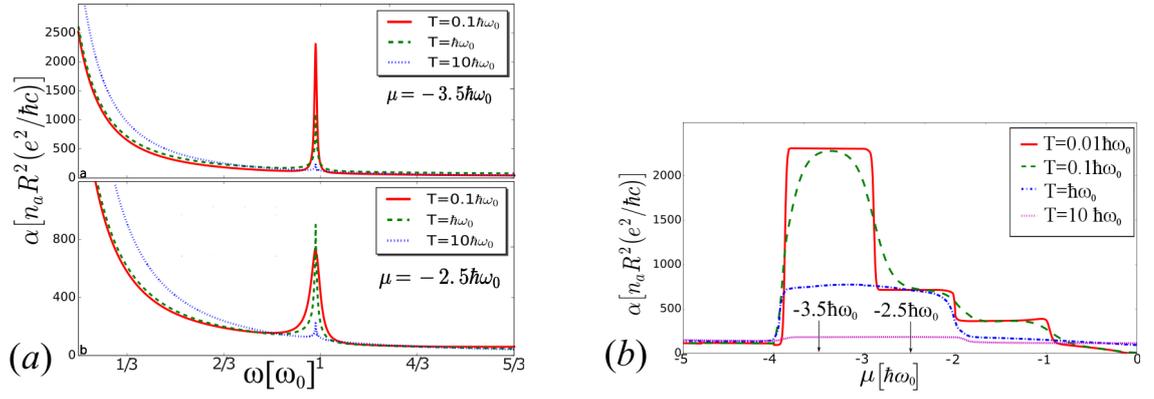


Рис. 4. Зависимость коэффициента внутризонного поглощения, задаваемого формулой (17) от частоты (a) и от уровня Ферми на резонансной частоте (b) при значении феноменологического параметра $a = -0.15$.

В разделе **3.2** строится базис задачи рассеяния на единичном наноотверстии в графене, с помощью которого вычисляется вклад внутризонных переходов в коэффициент поглощения наноперфорированного графена в пределе малой концентрации наноотверстий $n_a \ll 1/R^2$. Для состояний в валентной зоне этот вклад описывается следующим выражением:

$$\alpha(\omega) = \frac{32g_s n_a e^2 v^2 (\hbar v / R)^2}{\pi^2 \omega c} \int_0^{+\infty} d\varepsilon \left\{ \frac{f(-\varepsilon - \hbar\omega) - f(-\varepsilon)}{\varepsilon(\varepsilon + \hbar\omega)((\varepsilon + \hbar\omega)^2 - \varepsilon^2)^2} \right\} \times$$

$$\times \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \frac{(\varepsilon + \hbar\omega + \tau 2a^\tau \hbar v (l+1)/R + a^{2\tau} \varepsilon)^2}{\left| H_l^{(2)}(kR) + \tau a^\tau H_{l+1}^{(2)}(kR) \right|^2 \left| H_{l+1}^{(2)}(kR + \omega R/v) + \tau a^\tau H_{l+2}^{(2)}(kR + \omega R/v) \right|^2} \quad (17)$$

где $g_s = 2$ – фактор спинового вырождения в графене, $f(\varepsilon)$ – функция распределения Ферми-Дирака, $H_{l+1, l+2}^{(2)}(z)$ – функция Ганкеля второго рода, c – скорость света, e – абсолютное значение заряда электрона. Рассеяние на наноотверстиях приводит к возникновению резонанса в коэффициенте поглощения (17) на частоте $\omega \approx \omega_0$, отвечающей разности ближайших уровней краевых состояний, рис.4a. На резонансной частоте коэффициент поглощения является ступенчатой функцией уровня Ферми при низких температурах (см. рис.4b), что дает возможность создания на базе наноперфорированного графена оптических модуляторов, управляемых при помощи затвора.

В **Заключении** сформулированы основные результаты работы:

1. Найдены электронные спектры в нанопроволоке, описываемой эффективным изотропным трехмерным уравнением Дирака с однопараметрическим граничным условием, удовлетворяющим требованиям эрмитовости и симметрии инверсии времени задачи. Знак параметра в граничном условии определяет тип спектра поверхностных подзон. При положительных значениях граничного параметра поверхностные подзоны формируются в объемной запрещенной зоне, как в нанопроволоках из топологических изоляторов. При отрицательных значениях граничного параметра поверхностные подзоны образуются на фоне размерно-квантованных состояний в отсутствие магнитного поля. Включение продольного магнитного поля приводит к появлению осциллирующего по магнитному потоку вклада в плотность поверхностных состояний и магнитопроводимость для обоих типов спектра поверхностных подзон. Фаза осцилляций изменяется от π в слабых магнитных полях до 2π в пределе сильных полей.
2. Выведено ГУ для огибающих функций в 3D ТИ типа $\text{Bi}_2(\text{Se}, \text{Te})_3$. Пространственные симметрии поверхности (111) и симметрия по отношению к инверсии времени позволяют сократить число феноменологических параметров в ГУ до трех. Показано, что в общем случае ПС не имеют конической дисперсии.
3. Рассмотрен вопрос о спектрах краевых состояний в 2D ТИ, описываемых в модели сильной связи четырьмя орбиталями на каждом узле квадратной решетки. Показано, что общее инвариантное относительно инверсии времени граничное условие не нарушает соответствие "объем-граница" в 2D ТИ.
4. Предсказано, что коэффициент поглощения наноперфорированного графена имеет резонанс на частотах, соответствующих расстоянию меж-

ду ближайшими уровнями энергий краевых состояний, локализованных вблизи каждого нанотверстия. Амплитудное значение коэффициента поглощения на резонансной частоте, будучи сложной функцией параметров системы (уровня Ферми, температуры), может достигать нескольких процентов для реально достижимых концентраций нанотверстий в листе графена. Для отверстий нанометрового диаметра резонансная частота лежит в терагерцовом диапазоне. При освещении циркулярно поляризованным излучением резонанс в поглощении возникает только в одной из долин из-за долинной асимметрии спектра краевых состояний.

Список публикаций по теме диссертации

- A1. **Еналдиев, В. В.**, Волков В. А. Осцилляции Ааронова-Бома, обусловленные нетопологическими поверхностными состояниями в дираковских нанопроволоках // Письма в ЖЭТФ. 2016, Т.104, №11, С.806–812.
- A2. **Enaldiev, V. V.**, Zagorodnev I. V., Volkov V. A. Boundary Conditions and Surface State Spectra in Topological Insulators // Письма в ЖЭТФ. 2015, Т.101, №2, С.94–100.
- A3. **Еналдиев, В. В.**, Волков В. А. Резонансное поглощение терагерцового излучения в наноперфорированном графене // Письма в ЖЭТФ. 2016, Т.104, №9, С.546–650.
- A4. Zagorodnev I. V., Devizorova Z. A., **Enaldiev, V. V.** Resonant electron scattering by a graphene antidot // Phys. Rev. B. 2015. Vol. 92, no. 19. P. 195413.
- A5. Волков В. А., **Еналдиев, В. В.** Поверхностные состояния системы дираковских фермионов: минимальная модель // ЖЭТФ. 2016, Т.149, №3, С.702–716.

- A6. Volkov V. A., **Enaldiev, V. V.**, Zagorodnev I. V. Quantum antidot in graphene // Proceedings of 18-th International Symposium "Nanostructures: Physics and Technology". 2010. P. 92.
- A7. **Enaldiev, V. V.**, Zagorodnev I. V., Volkov V. A. Effect of surface potential on topological surface states // Book of Abstracts. Workshop "New trends in topological insulators". 2014. P. 58.
- A8. **Enaldiev, V. V.**, Zagorodnev I. V., Volkov V. A. Interface effect on surface and edge states in Topological insulators // Proceedings of 22-nd International Symposium "Nanostructures: Physics and Technology". 2014. P. 146.
- A9. **Еналдиев, В. В.**, Волков В. А. Размерное квантование и таммовские состояния массивных дираковских фермионов в квантовой проволоке // Труды 18-го Международного симпозиума "Нанофизика и нанофотоника". Vol. 2. 2014, Т.2, С.486. P. 468.
- A10. **Еналдиев, В. В.**, Загороднев И. В., Фролов А. В., Волков В. А. Размерное квантование и проводимость дираковских фермионов в висмутовых нанопроволоках // Сборник трудов 15-ой Школы молодых ученых "Актуальные проблемы физики". 2014, С.114.
- A11. **Еналдиев, В. В.**, Волков В. А. Поверхностные состояния в висмутовой нанопроволоке // Тезисы докладов 12-ой Российской конференции по физике полупроводников. 2015, С.41.
- A12. **Enaldiev, V. V.**, Volkov V. A. Resonance optical absorption in nanoperoforated graphene // Graphene Week 2016 Abstract Book. 2016. P. 229.
- A13. **Enaldiev, V. V.**, Volkov V. A. Response of nanoperoforated graphene in terahertz range // The Joint Conference of New Trends on Topological Insulators and 17-th International Conference on Narrow Gap Systems. 2016. P. 130.

Цитированная литература

1. Зи С. Физика полупроводниковых приборов. Кн.2, гл.8. 1981.
2. Novoselov K. S., Geim A. K., Morozov S. V. et al. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films // Science. 2004. Vol. 306. P. 666.
3. Tamm I. A possible kind of electron binding on crystal surfaces // Phys. Z. Sowjetunion. 1932. Vol. 1. P. 733.
4. Shockley W. On the Surface States Associated with a Periodic Potential // Phys. Rev. 1939. Vol. 56, no. 4. P. 317–323.
5. Peres N. M. R., Guinea F., Neto A. H. C. Electronic properties of disordered two-dimensional carbon // Phys. Rev. B. 2006. Vol. 73, no. 12. P. 125411.
6. Kane C. L., Mele E. J. Z₂ Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect // Phys. Rev. Lett. 2005. Vol. 95, no. 14. P. 146802.
7. Hasan M. Z., Kane C. L. Colloquium: Topological insulators // Rev. Mod. Phys. 2010. Vol. 82. P. 3045.
8. Qi X. L., Zhang S. C. Topological insulators and superconductors // Rev. Mod. Phys. 2011. Vol. 83. P. 1057.
9. Zhang H., Liu C.-X., Qi X.-L. et al. Topological insulators in Bi₂Se₃, Bi₂Te₃ and Sb₂Te₃ with a single Dirac cone on the surface // Nature Physics. 2009. Vol. 5. P. 438.
10. Zeljkovic I., Okada Y., Serbyn M. et al. Dirac mass generation from crystal symmetry breaking on the surfaces of topological crystalline insulators // Nature Materials. 2015. Vol. 14, no. 3. P. 318–324.
11. Egorova S. G., Chernichkin V. I., Ryabova L. I. et al. Detection of highly conductive surface electron states in topological crystalline insulators Pb_{1-x}Sn_xSe using laser terahertz radiation // Sci. Rep. 2015. Vol. 5. P. 11540.
12. Волков В. А., Пинскер Т. Н. Спиновое расщепление электронного спектра в ограниченных кристаллах с релятивистской зонной структурой //

ФТТ. 1981, Т.23, С.1756.

13. Bernevig B. A., Hughes T. L., Zhang S.-C. Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells // Science. 2006. Vol. 314, no. 5806. P. 1757–1761.

