

Электронные состояния немагнитных дефектов в 2D топологических изоляторах

В. А. Сабликов*, А. А. Суханов

Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, пл. академика Введенского, 1, Фрязино, Московская обл., 141190.

*sablikov@gmail.com

Показано, что немагнитные дефекты с короткодействующим потенциалом в двумерных топологических изоляторах создают два состояния, отличающиеся псевдоспиновой структурой и пространственным распределением электронной плотности. При взаимодействии дефекта с границей образуются краевые состояния, обтекающие дефект, которые характеризуются резонансами спектральной плотности числа электронов, аккумулированных вблизи дефекта. Взаимодействие резонансов разных типов приводит к образованию связанных состояний в непрерывном спектре.

Введение

В докладе изучаются электронные состояния, индуцированные немагнитными дефектами в 2D топологических изоляторах (ТИ). Интерес к этой проблеме связан с нетривиальной физикой образования локализованных состояний в ТИ, выяснением роли эванесцентных состояний в формировании электронной структуры дефекта, а также с изучением возможных механизмов рассеяния электронов в краевых состояниях. Расчеты проводятся для немагнитных дефектов с короткодействующим потенциалом в рамках континуальной модели Берневига–Хьюза–Чжана [1]. Рассматриваются как изолированные дефекты в объеме, так и дефекты, взаимодействующие с краевыми состояниями.

Связанные состояния на дефектах в объеме 2D ТИ

Для дефекта, расположенного вдали от границы в объеме 2D ТИ, получены следующие результаты [2]. Дефект, при любом знаке его потенциала, создает два связанных состояния для каждой ориентации спина, а не одно, как в тривиальном случае. Состояния отличаются псевдоспиновой структурой и классифицируются как состояния электронного и дырочноподобного типа в зависимости от того, какая из компонент псевдоспина обращается в ноль на дефекте. В свою очередь как электроподобные, так и дырочноподобные состояния могут быть двух типов, которые различаются пространственным распределением электронной плотности. В состояниях первого типа плотность имеет максимум в месте расположения дефекта, а в состояниях второго типа плотность достигает минимума в центре.

Необычный вид имеет зависимость энергии связанных состояний от потенциала дефекта (рис. 1). При малом потенциале дырочноподобные состояния первого типа возникают с энергией на дне запрещенной зоны, а электроподобные состояния первого типа – на потолке. С ростом потенциала их энергия изменяется до некоторого предельного уровня, лежащего для дырочноподобных состояний вблизи потолка запрещенной зоны, E_h , а для электроподобных состояний – E_e , вблизи дна. Энергия состояний второго типа изменяется в более узком интервале между уровнем предельной энергии для электро- или дырочноподобных состояний и ближайшим краем запрещенной зоны.

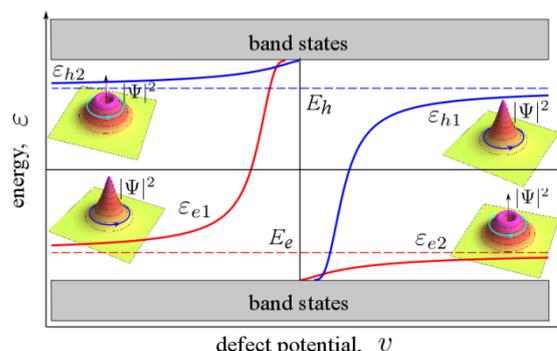


Рисунок 1. Энергия связанных состояний в объеме 2D ТИ в зависимости от потенциала дефекта. ϵ_{e1} , ϵ_{e2} – энергии электроподобных состояний первого и второго типа, ϵ_{eh1} , ϵ_{h2} – энергии дырочноподобных состояний. На вставках показана радиальная зависимость плотности частиц $|\Psi|^2$ для соответствующих состояний.

Наличие связанных состояний двух типов является следствием того факта, что в 2D ТИ имеются два механизма образования локализованных состояний. Один связан с захватом на дефект носителя заряда из валентной зоны или из зоны проводимости в

зависимости от того, для каких носителей потенциал дефекта является притягивающим. Другой механизм является специфическим для ТИ. Он может быть интерпретирован как образование краевых состояний, циркулирующих вокруг дефекта.

Состояния, индуцированные дефектами, связанными краевыми состояниями

Дефект, находящийся на конечном расстоянии от границы, взаимодействует с краевыми состояниями, в результате чего формируются краевые состояния, обтекающие дефект [3]. Они имеют резонансы спектральной плотности числа электронов, аккумулированных на эванесцентных состояниях вблизи дефекта.

Резонансы сохраняют основные черты связанных состояний в объеме. В частности, они также классифицируются как электроно- и дырочноподобные резонансы, которые в свою очередь могут быть состояниями первого и второго типа в зависимости от пространственного распределения плотности частиц. Обтекающие дефект состояния с энергией, близкой к резонансу первого типа, имеют максимум электронной плотности в центре, тогда как в резонансах второго типа плотность в центре минимальна (рис. 2).

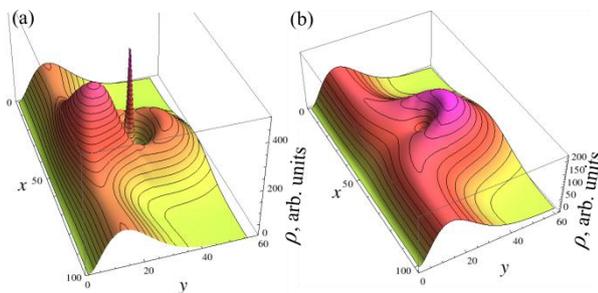


Рисунок 2. Пространственное распределение плотности частиц в резонансных состояниях, обтекающих дефект, первого (а) и второго (б) типа.

Энергия резонансов изменяется с расстоянием между дефектом и границей таким образом, что при приближении дефекта к границе резонансы сдвигаются к соответствующим краям щели. При этом состояния второго типа исчезают, если это расстояние достаточно мало.

Рассеяние электронов из краевых состояний в эванесцентных состояниях вокруг дефекта приводит к накоплению значительного заряда в области расположения дефекта. Величина накопленного заряда

зависит от заполнения краевых состояний. Если уровень химического потенциала лежит выше резонанса, то накапливается заряд порядка одного элементарного заряда. Потенциал, создаваемый таким зарядом, оказывается достаточно большим и в реальных условиях сопоставимым с энергетической щелью. В таком случае становится существенным межэлектронное взаимодействие, влияющее на структуру краевых состояний, обтекающих дефект, и их заполнение.

Краевые состояния, обтекающие дефект, несут ток, противоположный по направлению для каждой ориентации спина. Пространственная конфигурация поля вектора тока имеет две компоненты, одна из которых соответствует токам, циркулирующим вокруг дефекта, а другая – обтекающим его (рис. 3).

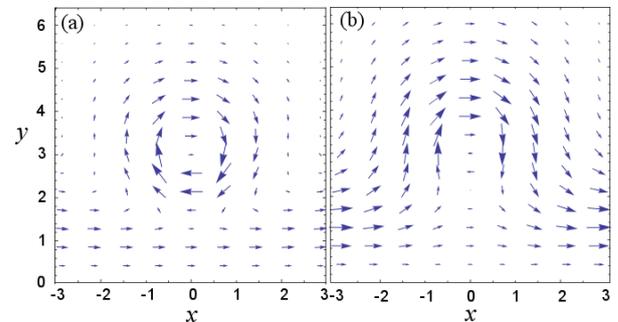


Рисунок 3. Поле плотности тока в резонансных состояниях первого (а) и второго (б) типа.

Еще одно качественно новое свойство электронных состояний, индуцированных дефектом, возникает в условиях, когда энергии резонансов электронного и дырочного типа близки. Это происходит в небольшом интервале величины потенциала дефекта. Взаимодействие резонансов снимает их вырождение. В результате резонансные уровни расталкиваются. Но возникает и еще один совершенно нетривиальный эффект. В дополнение к краевым состояниям, обтекающим дефект, образуется локализованное состояние с квадратично интегрируемой волновой функцией и с определенной энергией в континууме краевых состояний. Связанное состояние в континууме формируется вследствие деструктивной интерференции резонансов.

Литература

1. B. A. Bernevig, T. L. Hughes, S. C. Zhang // *Science*, V. 314, 1757 (2006).
2. V. A. Sablikov, A. A. Sukhanov // *Phys. Status Solidi*, V. 8, 853 (2014).
3. V. A. Sablikov, A. A. Sukhanov // *Phys. Rev. B* (accepted).