

КОНФЕРЕНЦИИ И СИМПОЗИУМЫ**Поверхностные состояния топологических изоляторов**

О.А. Панкратов

Топологические электронные состояния были предсказаны Б.А. Волковым и О.А. Панкратовым в 1985 г. как пограничные состояния в инверсном контакте между полупроводниками IV–VI со взаимно инвертированными зонами. Как стало ясно впоследствии, "инвертированный" полупроводник SnTe является топологическим изолятором и инверсный контакт служит примером топологически нетривиальной границы. Обсуждаются основные результаты работы Б.А. Волкова и О.А. Панкратова 1985 года и рассматривается, чем модель инверсного контакта может быть полезна для объяснения тесной связи между топологически нетривиальной зонной структурой в объёме и топологическими состояниями на поверхности. Модель инверсного контакта даёт определённые преимущества для более глубокого понимания этой связи, поскольку она допускает аналитическое решение. Неоднородная полупроводниковая структура описывается с помощью эффективного гамильтониана Дирака для материалов IV–VI, полученного аналитически из модели сильной связи. Это позволяет проследить связь между топологическими поверхностными состояниями и зонами в объёме. В результате спиновая текстура поверхностных состояний может быть явно выражена через объёмные характеристики. Оказывается, что спиновой текстурой можно управлять, изменяя изгиб зон на поверхности. В связи с нетривиальной спиновой поляризацией на поверхности интересно рассмотреть взаимодействие Рудермана–Киттеля–Касуи–Иосиды (РККИ) магнитных адатомов, которое может служить локальным зондом для спинового распределения. Это взаимодействие имеет гораздо более сложную структуру, чем в случае обычного неполяризованного ферми-газа. Аналитическая теория позволяет получить явную связь между РККИ-взаимодействием на поверхности топологического изолятора и параметрами объёмного спектра.

Ключевые слова: топологические изоляторы, топологические поверхностные состояния, инверсный контакт, спиновая текстура

PACS numbers: 73.20.–r, 73.40.Lq, 73.43.Cd

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2017.12.038307>**Содержание**

1. Введение: инверсный контакт (1226).
 2. Топологические изоляторы (1228).
 3. Является ли инверсный контакт PbTe/SnTe топологической границей? (1229).
 4. Откуда берётся эффективный гамильтониан Дирака? Аналитическая теория зонной структуры полупроводников IV–VI (1231).
 5. Топологические поверхностные состояния и спиновая текстура (1233).
 6. Взаимодействие Рудермана–Киттеля–Касуи–Иосиды на поверхности топологического изолятора (1236).
 7. Заключение (1237).
- Список литературы (1237).

1. Введение: инверсный контакт

Топологические изоляторы находятся в центре внимания современных исследований по физике твёрдого тела. Не

будет преувеличением сказать, что их открытие — это наиболее существенное достижение в физике конденсированных сред в течение последнего десятилетия. Существует много обзоров, книг и обзорных докладов на эту тему [1–3], и в настоящей статье не ставится задачи пополнить этот список ещё одним вкладом. Вместо этого я хотел бы рассказать о том, как эти недавние достижения связаны с работами 1980-х годов, которые теперь признаны пионерскими в этой области, а также показать, что развитый в то время подход полезен для более глубокого понимания связи между нетривиальной зонной структурой в объёме и топологическими состояниями на поверхности. Насколько мне известно, Юрий Васильевич Копаев в последние годы жизни очень интересовался этой тематикой и читал лекции о топологических изоляторах. В самом деле, это в точности та красивая физика, которую любил Юрий Васильевич, действительно "копаевская" физика.

Моя история начинается в стенах Физического института им. П.Н. Лебедева (ФИАН), в начале 1980-х годов, когда мы с Б.А. Волковым опубликовали статью [4] в *Письмах в журнал экспериментальной и теоретической физики*, которая кратко излагается ниже. Рассмотрим дираковский электрон с энергией

$$E = \pm \sqrt{m^2 c^4 + c^2 p^2}. \quad (1)$$

О.А. Панкратов. University of Erlangen-Nürnberg,
Staudstr. 7-B2, 91058 Erlangen, Germany
E-mail: Oleg.Pankratov@fau.de

Статья поступила 29 января 2018 г.

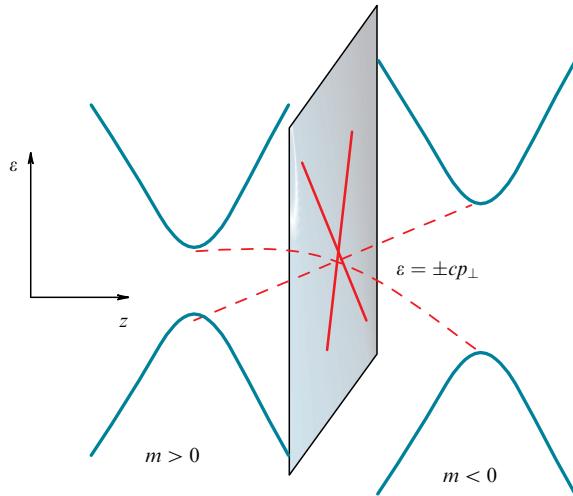


Рис. 1. Инверсный контакт между двумя дираковскими пространствами с отрицательной и положительной массами покоя. Независимо от конкретной формы перехода на поверхности контакта существуют невырожденные по спину вейлевские электронные состояния с линейной дисперсией.

Очевидно, что знак массы покоя здесь неважен, поскольку в формулу (1) входит m^2 . Однако если мы представим, что масса является функцией координат и эта функция может менять знак, то мы столкнёмся с новым эффектом. Если масса зависит, например, от координаты z и $m(z)$ меняет знак при $z = 0$, то независимо от конкретного вида функции $m(z)$ всегда существуют связанные состояния, локализованные у плоскости $z = 0$. В плоскости $z = 0$ эти состояния являются, разумеется, плоскими волнами. Их энергия линейно зависит от импульса $\varepsilon(\mathbf{p}_{\perp}) = \pm cp_{\perp}$, где $\mathbf{p}_{\perp} = (p_x, p_y)$ импульс в плоскости $z = 0$ (рис. 1). Интересно, что эти состояния не вырождены по спину, т.е. спиновая структура дираковской волновой функции "заморожена". В результате на границе раздела мы имеем двумерные киральные безмассовые частицы — вейлевские нейтрино.

В 1985 г. инверсный контакт представлялся весьма спекулятивным предложением. Позднее линейный электронный спектр был экспериментально обнаружен в графене и спустя некоторое время в топологических изоляторах. В графене аналогия с инверсным контактом неполна, так как спин остаётся "свободным", не связанным с орбитальным движением вследствие чрезвычайной малости спин-орбитального взаимодействия. На против, двумерные состояния на поверхности топологического изолятора представляют собой полную аналогию вейлевских фермионов.

Разумеется, в работе [4] мы имели в виду некоторую конкретную реализацию переменной дираковской массы. Дело в том, что в семействе полупроводников IV–VI присутствуют материалы со взаимно инвертированными зонами, т.е. с положительной и отрицательной дираковской массами. В этих полупроводниках прямая запрещённая зона находится в точках L зоны Бриллюэна. Электронный спектр вблизи экстремальных точек с очень хорошей точностью описывается эффективным гамильтонианом Дирака. Волновые функции на краях зон имеют определённую чётность, которая противоположна для зоны проводимости и валентной зоны. Так, в PbTe зона проводимости L_6^- нечётна, а валентная зона L_6^+

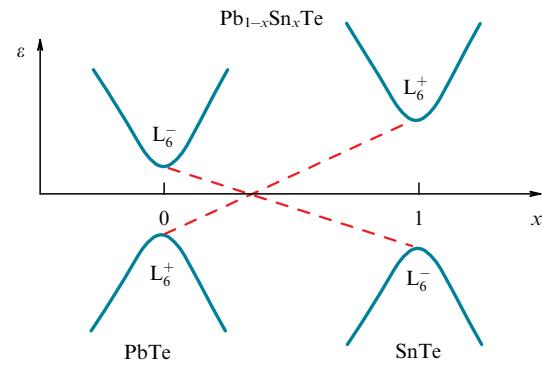


Рис. 2. Инверсия краёв зон в Pb_{1-x}Sn_xTe по мере увеличения содержания олова.

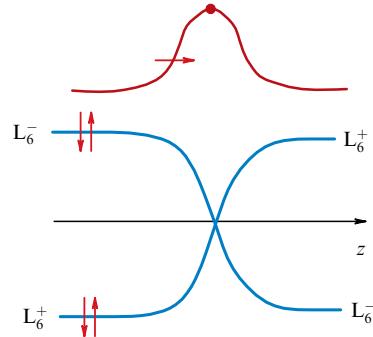


Рис. 3. Энергетическая диаграмма инверсного контакта в реальном пространстве. Здесь пренебрегается возможным сдвигом центра запрещённой зоны, который рассматривается ниже. Ширины запрещённых зон по обе стороны контакта тоже не обязательно должны быть равны. Локализованное на границе вейлевское состояние имеет фиксированную спиновую структуру, тогда как объёмные зоны вырождены по спину.

чётна (обычно чётность определяется для системы координат с началом отсчёта на узле решётки, занятом катионом, в данном случае Pb). В SnTe чётности краёв зон меняются местами. Поэтому в твёрдых растворах Pb_{1-x}Sn_xTe постепенное увеличение содержания Sn приводит к тому, что запрещённая зона уменьшается, обращается в нуль и, наконец, инвертирует (рис. 2). Следовательно, изменяя концентрацию Sn в реальном пространстве, например по мере роста кристалла, можно реализовать пространственную инверсию зон (рис. 3), т.е. создать структуру, которую мы называли инверсным контактом (в литературе такую структуру называют также "топологическим гетеропереходом" [5, 6]). Как мы видели выше, универсальным свойством этой структуры являются двумерные вейлевские электронные состояния на границе раздела.

Неоднородная структура, изображённая на рис. 3, описывается уравнением Дирака с переменной массой, где величина mc^2 заменяется некоторой функцией $\Delta(z) = -\Delta_0 f(z)$, меняющей знак при пересечении плоскости $z = 0$. Разумеется, скорость света должна быть заменена некоторыми зависящими от материала параметрами, параллельной и перпендикулярной к оси z скоростями $v_{||}$ и v_{\perp} . Как мы показали в работе [4], уравнение Дирака

$$\hat{H}(z, \mathbf{p}_{\perp}) \Psi = \varepsilon(\mathbf{p}_{\perp}) \Psi \quad (2)$$

всегда имеет по крайней мере одно локализованное вдоль z решение *независимо от конкретной формы функции $f(z)$* . Единственным условием, налагаемым на $f(z)$, является смена знака. В плоскости перехода энергия этих состояний имеет линейную дисперсию

$$\varepsilon(\mathbf{p}_\perp) = \pm v_\perp p_\perp. \quad (3)$$

В то время как объёмные зоны вырождены по спину, пограничное состояние реализуется только в определённой спиновой конфигурации, т.е. имеет фиксированную спиновую структуру

$$\Psi_\pm = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \exp \left[-i \left(\frac{\theta}{2} + \frac{\pi}{4} \right) \right] \\ \pm \exp \left[i \left(\frac{\theta}{2} + \frac{\pi}{4} \right) \right] \\ \exp \left[-i \left(\frac{\theta}{2} - \frac{\pi}{4} \right) \right] \\ \pm \exp \left[-i \left(\frac{\theta}{2} - \frac{\pi}{4} \right) \right] \end{pmatrix} \times \times \exp \left[-\frac{1}{\hbar v_\parallel} \int_0^z A(z) dz + i \mathbf{p}_\perp \cdot \mathbf{r} \right]. \quad (4)$$

В формуле (4) знаки плюс/минус относятся к положительной/отрицательной ветви спектра, а фазовые множители определяются полярным углом θ , который задаёт направление лежащего в плоскости контакта импульса \mathbf{p}_\perp . Очевидно, что волновая функция (4) экспоненциально локализована вдоль оси z при условии, что $A(z)$ меняет знак. В противном случае функция (4) ненормируема и связанное состояние исчезает. В плоскости перехода $z = 0$ пограничное состояние является собственным состоянием эффективного гамильтонiana Вейля

$$\hat{H}_W = v_\perp \tau_\perp \mathbf{p}_\perp \quad (5)$$

с линейным законом дисперсии (3). В формуле (5) $\tau_\perp = (\tau_x, \tau_y)$ — вектор матриц Паули псевдоспина вейлев-

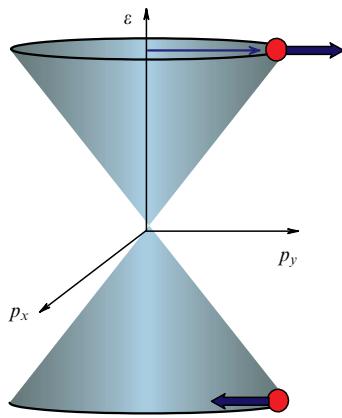


Рис. 4. Конус Дирака – Вейля: зависимость энергии от импульса в плоскости контакта. Положительная и отрицательная по энергии области соответствуют ориентации псевдоспина параллельно или антипараллельно импульсу, т.е. положительной или отрицательной киральности.

ских частиц. Проекция τ_\perp на \mathbf{p}_\perp даёт собственные значения киральности ± 1 , отвечающие положительной или отрицательной ветви спектра в уравнении (3) (рис. 4). Удивительным свойством решения (4) является, наряду с отсутствием спинового вырождения, его нечувствительность к конкретной форме $f(z)$. В 1985 г., когда мы опубликовали работу [4], причины, лежащие в основе этих необычных свойств, были неясны. Теперь мы знаем, что в основе этого явления лежит топология зонной структуры полупроводникового материала.

2. Топологические изоляторы

Зонные структуры диэлектрических материалов могут быть классифицированы [1–3] в соответствии с топологией гильбертова пространства, характеризующего электронные состояния в зоне Бриллюэна. Определённая топология в свою очередь характеризуется соответствующим топологическим индексом, который не меняется при любой непрерывной деформации гамильтонiana при условии, что эта деформация не приводит к пересечению энергетических уровней. Любое изменение топологического индекса должно сопровождаться пересечением уровней и, следовательно, появлением промежуточного металлического состояния. Это происходит на границе раздела двух топологически различных материалов или на поверхности топологически нетривиального диэлектрика, которая представляет собой не что иное, как границу раздела с вакуумом. Металлические состояния на границе раздела должны быть не вырожденными по спину и иметь линейный закон дисперсии (рис. 5), т.е. обладать всеми свойствами вейлевского состояния (4). Здесь мы не ставим своей целью обзор топологической зонной теории, поэтому ограничимся лишь схематической иллюстрацией изменения топологии зонной структуры на примере топологической классификации поверхностей (рис. 6).

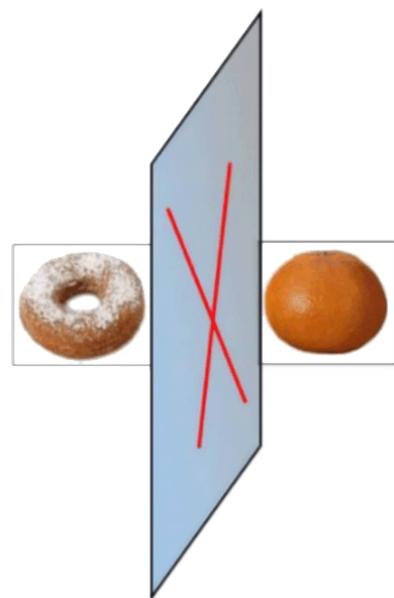


Рис. 5. Состояния Дирака – Вейля на границе раздела возникают как промежуточные металлические состояния, соединяющие два диэлектрических материала (один из которых может быть вакуумом) с различной топологией зонной структуры.

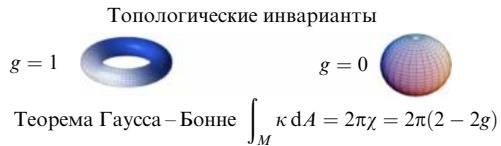


Рис. 6. Топологическая классификация поверхностей и теорема Гаусса–Бонне. Кривизна поверхности κ характеризуется двумя главными радиусами кривизны: $\kappa = 1/r_1 r_2$, g — число дырок.

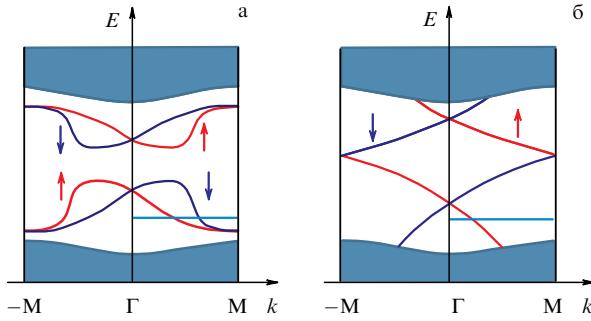


Рис. 7. Обычные поверхностные состояния (а) всегда образуют крамерово-сопряжённые пары (рисунок из [2]). Число пересечений поверхностных зон с линией постоянной энергии в этом случае чётно и любое поверхностное состояние может быть "выдавлено" из запрещённой зоны с помощью некоторого поверхностного потенциала. Это невозможно в случае (б) топологических поверхностных состояний, где число пересечений нечётно.

Хорошо известно, что для замкнутых поверхностей топологический индекс определяет их связность. Замечательная теорема Гаусса–Бонне утверждает, что интеграл (делённый на 2π) от кривизны поверхности, взятый по всей её площади, равен целому числу $2(1 - g)$, где g — число дырок в замкнутой поверхности.

Интеграл от кривизны на рис. 6 не изменяется при произвольной деформации поверхности до тех пор, пока не изменяется её топология, характеризуемая числом дырок. В случае зонной структуры топология характеризует "связность" гильбертова пространства состояний в зоне Бриллюэна.

Таким образом, изменение топологического индекса указывает на наличие пограничных/поверхностных состояний, которые универсальны, т.е. устойчивы к изменениям деталей поверхности или границы раздела. Это иллюстрируется на рис. 7. Обычные поверхностные состояния, показанные на рис. 7а, всегда образуют крамерово-сопряжённые пары зон. В отсутствие симметрии по отношению к инверсии спиновое вырождение снимается благодаря спин-орбитальному взаимодействию, но зоны поверхностных состояний должны пересекаться в точках высокой симметрии согласно теореме Крамерса. Такие поверхностные состояния в принципе всегда могут быть удалены из запрещённой зоны с помощью подходящего поверхностного потенциала. Напротив, состояния, показанные на рис. 7б, невозможно удалить, поскольку, переключаясь между крамеровыми партнёрами, они образуют непрерывную цепочку, соединяющую валентную зону с зоной проводимости. Из рисунка 7 очевиден простой способ, позволяющий различить "обычные" и "топологически защищённые" состояния. Для этого достаточно подсчитать число пересечений поверхностных зон с линией постоянной энергии. В случае обычных зон

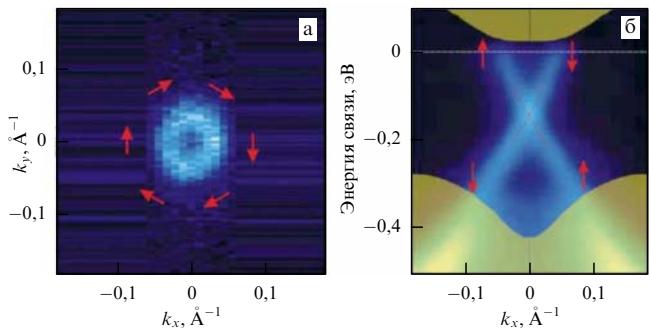


Рис. 8. Результаты ARPES-измерений топологических поверхностных состояний в Bi_2Se_3 [7]. Имеется единственный конус Дирака–Вейля в центре поверхностной зоны Бриллюэна. Наблюдаемая геликоидальная спиновая текстура циркулярно симметрична.

число пересечений чётно, в то время как для топологических зон оно нечётно.

В силу фиксированной спиновой структуры поверхностное состояние с импульсом $\mathbf{p}_\perp = (p_x, p_y)$ характеризуется определённым средним значением спина. Картина распределения спина в плоскости (p_x, p_y) представляет собой спиновую текстуру, которая является наиболее важной характеристикой топологического поверхностного состояния. Спиновые текстуры поверхностных зон измерялись с помощью электронной эмиссии с угловым и спиновым разрешением (Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy — ARPES) для различных топологических изоляторов. На рисунке 8 приведён пример таких измерений для Bi_2Se_3 . В этом материале имеется одно топологическое поверхностное состояние с единственным конусом Дирака–Вейля в центре зоны Бриллюэна. Спин ориентирован перпендикулярно импульсу, чего можно ожидать из соображений симметрии. Вместе с тем топологическая теория не может предсказать спиновую текстуру в общем случае. Ситуация представляется парадоксальной: с одной стороны, само существование топологических поверхностных состояний обусловлено спецификой зонного спектра материала. С другой стороны, мы не можем предсказать, что произойдёт с этим поверхностным состоянием при изменении объёмного спектра, и, вообще говоря, не можем предсказать вид спиновой текстуры, поскольку для этого должна быть известна аналитическая связь между топологическим состоянием на поверхности и объёмными зонами. К сожалению, большинство топологических изоляторов имеет довольно сложную кристаллическую структуру, что делает практически невозможным установить эту связь явно.

Расчёты из первых принципов, разумеется, воспроизводят как объёмную зонную структуру, так и поверхностные состояния, но связь между ними остаётся скрытой. В разделе 3 мы покажем, как с помощью модели инверсного контакта можно найти эту связь в явном аналитическом виде.

3. Является ли инверсный контакт PbTe/SnTe топологической границей?

На первый взгляд, критерий, сформулированный в разделе 2 (см. рис. 7 и подпись к нему), даёт отрицательный ответ на вопрос о том, является ли инверсный

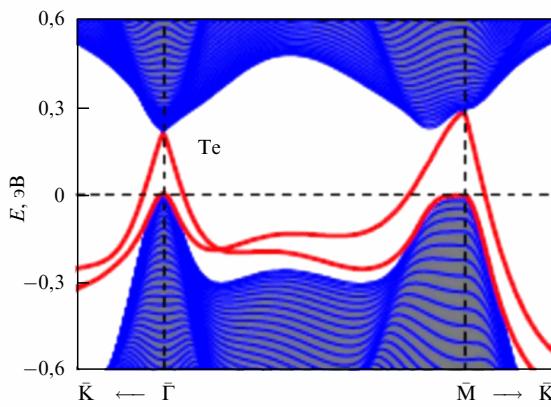


Рис. 9. Результаты численных расчётов состояний на (111)-Te-поверхности SnTe [8]. Две поверхностные зоны происходят из двух точек L объёмного спектра и относятся к разным классам симметрии по отношению к отражениям в плоскости (110).

контакт PbTe/SnTe топологической границей. В самом деле, экстремумы зон в полупроводниках IV–VI находятся в L-точках, причём имеются четыре неэквивалентные точки L в зоне Бриллюэна. В зависимости от ориентации поверхности эти L-точки по-разному проецируются на поверхность зону Бриллюэна, но их число всегда остаётся чётным. Следовательно, число поверхностных зон тоже чётно. В результате эти поверхностные состояния не могут быть топологически защищены симметрией по отношению к инверсии времени, обычно лежащей в основе топологической классификации [1–3]. Тем не менее численные расчёты для SnTe (рис. 9) показывают наличие хорошо определённых поверхностных состояний, происходящих из различных L-точек, которые не являются крамерсовыми парами, как на рис. 7а, а, напротив, пересекают всю запрещённую зону в соответствии с рис. 7б.

Две зоны поверхностных состояний на рис. 9, происходящие из точек L_2 и L_0 , показанных на рис. 10, не смешиваются в точке пересечения благодаря различной симметрии по отношению к отражениям в зеркальной плоскости (110) (рис. 10, 11). Кристаллическая симметрия берёт на себя защиту поверхностных состояний — роль, которую обычно в топологических изоляторах играет симметрия по отношению к инверсии времени. Таким образом, материалы типа SnTe относятся к разряду так называемых кристаллических топологических изоляторов, в которых топологическая стабильность поверхностных состояний обусловлена некоторой пространственной симметрией, общей как для объёмного кристалла, так и для поверхности [9]. Плоскость зеркального отражения (110) как раз и является таким элементом симметрии.

Соответствующий топологический индекс, который получил название "зеркального числа Черна" [10], определяется как разность между числами Черна для поверхностных зон с противоположными собственными значениями оператора зеркального отражения [11–14]:

$$n_M = \frac{n_{+i} - n_{-i}}{2}. \quad (6)$$

Для SnTe $n_M = -2$ [12]. Напротив, для топологически тривиального PbTe с "нормальным" порядком зон

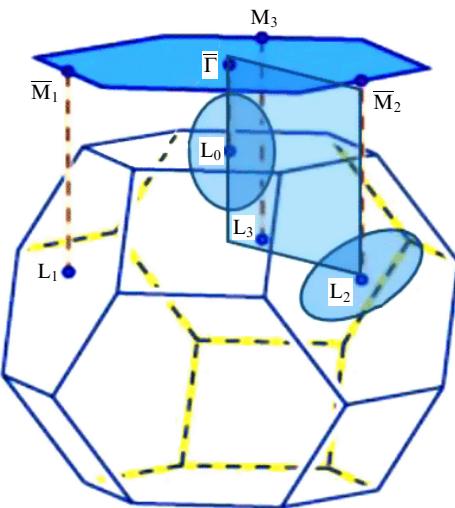


Рис. 10. Зона Бриллюэна SnTe (из работы [15]). Зонные экстремумы в объёмном кристалле расположены в центрах гексагональных граней — точках L, четыре из которых неэквивалентны. На поверхности (111) точки L проецируются в центральную точку $\bar{\Gamma}$ и три неэквивалентные точки M. Плоскость симметрии (110) является общей для объёмного кристалла и поверхности. Схематически показана анизотропия электронного спектра вблизи точек L.

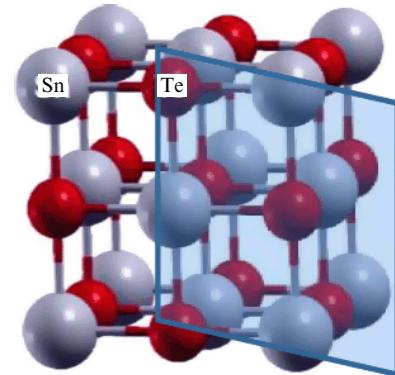


Рис. 11. Кристаллическая структура типа каменной соли SnTe (из работы [12]). Показана плоскость симметрии (110).

$n_M = 0$. Таким образом, инверсный контакт является топологической границей раздела, на которой изменяется зеркальное число Черна. Следовательно, пограничные электронные состояния, обнаруженные нами [4] в 1985 г., в самом деле имеют топологическое происхождение. Поэтому неудивительно, что эти состояния облашают всеми свойствами поверхностных состояний топологических изоляторов: являются невырожденными по спину и перекрывают всю запрещённую зону.

Спиновая текстура на поверхности (111) SnTe, рассчитанная из первых принципов [15], показана на рис. 12, 13. Как видно из рис. 12, поверхностные состояния в точках $\bar{\Gamma}$ и M , которые происходят из "прямой" и "наклонной" L-долин, имеют существенно различные текстуры. В точке $\bar{\Gamma}$ цилиндрическая симметрия диктует стандартную геликоидальную структуру, в которой спин всегда перпендикулярен вектору импульса.

Напротив, для поверхностных состояний в точке M нет симметрийных ограничений и спин не обязательно ориентирован перпендикулярно импульсу. Более того,

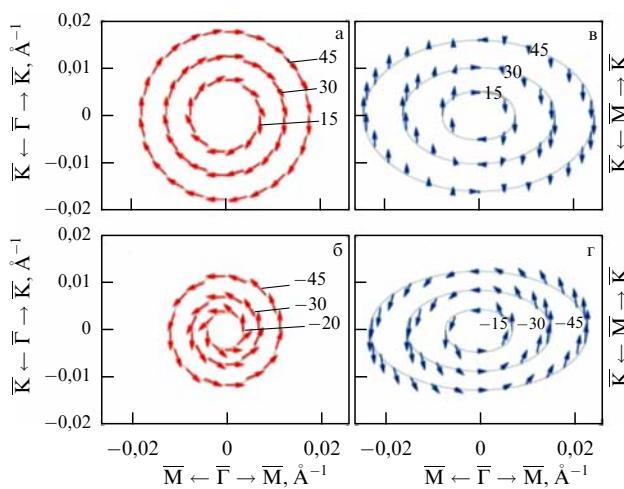


Рис. 12. Результаты расчётов *ab initio* спиновой текстуры для (111)-поверхности SnTe [15]. Показана проекция спина на плоскость поверхности для верхней (а, в) и нижней (б, г) ветви конического спектра Дирака – Вейля. Рисунки а и б относятся к Г-точке, рис. в и г — к М-точке. Числа показывают значения энергии (в мэВ) для соответствующих изоэнергетических контуров.

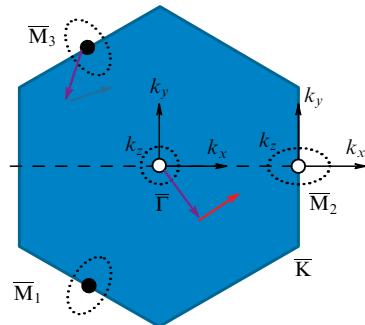


Рис. 13. Поверхностная зона Бриллюэна для (111)-поверхности SnTe. (Рисунок из работы [15].)

здесь отлична от нуля нормальная к поверхности компонента спина, которая строго отсутствует для Г-состояний. Эти результаты показывают, что спиновая текстура поверхностных топологических состояний тесно связана с соответствующими объёмными электронными состояниями. Однако только аналитическая теория может позволить выяснить эту связь. Именно здесь оказывается полезной модель инверсного контакта для топологических изоляторов группы IV–VI, в рамках которой можно придать топологическому принципу соответствия объём–граница [1–3] явный аналитический вид.

Для того чтобы рассчитать спиновую текстуру, необходимо выяснить, каким образом информация о реальном спине содержится в эффективном гамильтониане Дирака (2). Матрица этого гамильтониана определена в пространстве крамерово-сопряжённых состояний, которые не являются собственными для оператора спина. Поэтому для вычисления средних значений спина должны быть известны базисные функции, на которых построен гамильтониан Дирака. Для этого мы должны вернуться немного назад по времени, к началу 1980-х годов, когда мы с Б.А. Волковым сформулировали аналитическую теорию зонной структуры полупроводников

IV–VI [16, 17]. Именно эти работы привели нас впоследствии к идею инверсного контакта.

4. Откуда берётся эффективный гамильтониан Дирака? Аналитическая теория зонной структуры полупроводников IV–VI

Эффективный гамильтониан Дирака в окрестности L-точки может быть получен из общей картины зонной структуры полупроводников IV–VI. Модель сильной связи с блоховскими функциями, построенными из атомных p-орбиталей [16, 17], даёт ясную картину этой зонной структуры. Учитывая кубическую симметрию кристаллической решётки, локальные p-орбитали удобно выбрать в виде функций, имеющих симметрию декартовых координат x , y , z (рис. 14). Из этих функций строятся блоховские состояния $|x\rangle$, $|y\rangle$, $|z\rangle$.

В представлении $|x\rangle$, $|y\rangle$, $|z\rangle$ сразу становится ясно, почему точки L зоны Бриллюэна (рис. 15) играют особую

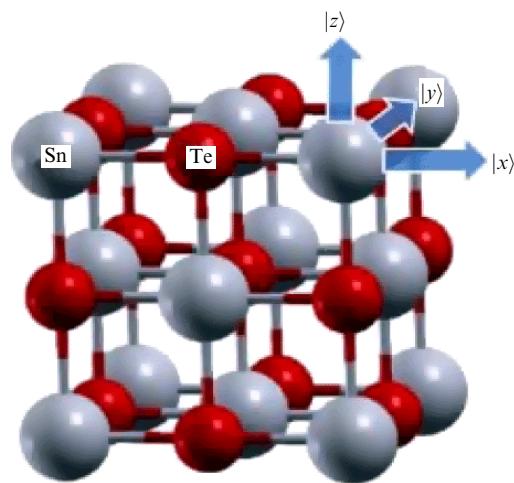


Рис. 14. Симметрия локальных p-орбиталей для базисных блоховских функций в приближении сильной связи [16, 17]. (Рисунок из работы [12].)

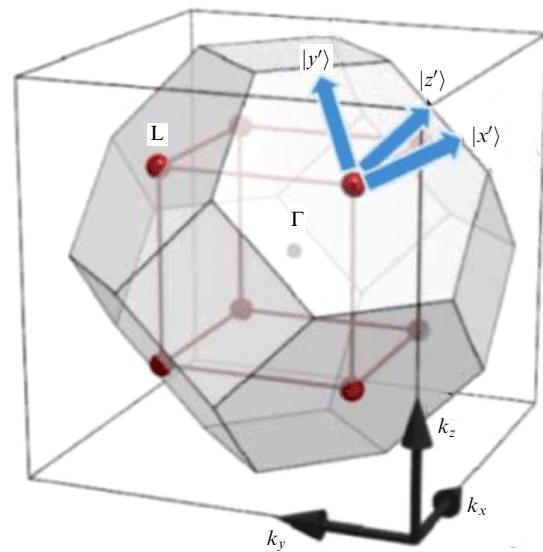


Рис. 15. В точке L симметрия диктует выбор блоховских p-функций в повёрнутой системе координат с осью z' вдоль оси симметрии [111].

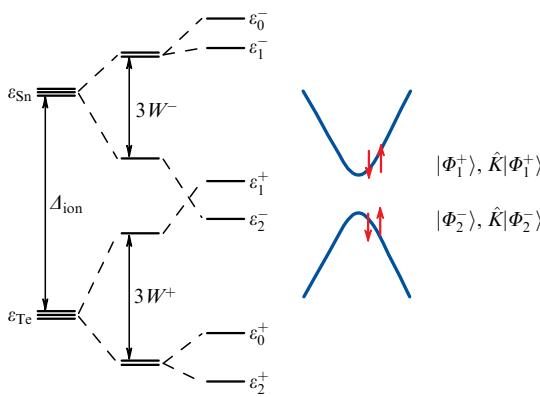


Рис. 16. Формирование узкой запрещённой зоны в точке L из блоховских состояний p-симметрии. Триплеты p-состояний Sn и Te разделены энергетической щелью, обусловленной разностью атомных энергий ионизации Δ_{ion} , которая резко уменьшается вследствие расщепления уровней кристаллическим полем W и спин-орбитальным взаимодействием. Инверсия краёв запрещённой зоны происходит, когда расщепление исходных триплетов превышает изначальную разницу их энергий [17].

роль в полупроводниках IV–VI. В этих точках волновые функции сильной связи распадаются на суммы либо только по узлам решётки, занятым элементом IV группы Pb, Sn, Ge (представляющим собой нечётные состояния), либо только по узлам элементов VI группы Te, Se (для чётных состояний). По отношению к оси симметрии [111] функции $|x\rangle$, $|y\rangle$, $|z\rangle$ совершенно равноправны, следовательно, соответствующие уровни энергии вырождены — если пренебречь их взаимодействием через кристаллическое поле и спин-орбитальным расщеплением атомных p-орбиталей. Это вырождение снимается вследствие смешивания состояний $|x\rangle$, $|y\rangle$, $|z\rangle$ кристаллическим полем (возникающим во второй координационной сфере), а также спин-орбитального взаимодействия. Расщепление триплетных уровней типа Sn и Te резко уменьшает запрещённую зону, в результате чего в L-точке образуется наименьшая энергетическая щель в электронном спектре (рис. 16). Поскольку имеется шесть валентных p-электронов в элементарной ячейке, три нижних уровня заполнены, т.е. относятся к валентным зонам, а три верхних формируют зоны проводимости. Таким образом, энергетические уровни, происходящие из атомных состояний IV группы, формируют нечётные зоны проводимости, в то время как состояния, происходящие из элемента VI группы, — чётные валентные зоны. Однако в некоторых случаях, как, например, в SnTe, уменьшение энергетической щели настолько сильно, что края запрещённой зоны меняются местами и возникает инверсная запрещённая зона (см. рис. 16).

Инвертированный порядок зон реализуется в SnTe, в отличие от "нормального" порядка, реализующегося, например, в PbTe. Нормальное расположение зон можно рассматривать как топологически эквивалентное вакууму. Действительно, расположение уровня катиона IV группы выше уровня аниона VI группы соответствует тому, чего можно ожидать в отсутствие кристаллического поля, т.е. при неограниченном увеличении постоянной решётки. Следуя схеме, изображённой на рис. 16, можно сконструировать волновые функции в

L-точке [17]:

$$\begin{aligned} |\Phi_2^-\rangle &= -\sin \frac{\theta^-}{2} |\Phi_{+}^{-\downarrow}\rangle + \cos \frac{\theta^-}{2} |\Phi_0^{-\uparrow}\rangle, \\ \hat{K}|\Phi_2^-\rangle &= -\sin \frac{\theta^-}{2} |\Phi_{-}^{-\uparrow}\rangle + \cos \frac{\theta^-}{2} |\Phi_0^{-\downarrow}\rangle, \\ |\Phi_1^+\rangle &= -\cos \frac{\theta^+}{2} |\Phi_{+}^{+\downarrow}\rangle + \sin \frac{\theta^+}{2} |\Phi_0^{+\uparrow}\rangle, \\ \hat{K}|\Phi_1^+\rangle &= \cos \frac{\theta^+}{2} |\Phi_{-}^{+\uparrow}\rangle + \sin \frac{\theta^+}{2} |\Phi_0^{+\downarrow}\rangle, \end{aligned} \quad (7)$$

В правой части формул (7) фигурируют блоховские функции $|\Phi_0^\pm\rangle$, $|\Phi_\pm^\pm\rangle$, которые трансформируются согласно неприводимым представлениям малой группы D_{3d} точки L и являются комбинациями блоховских состояний $|x'\rangle$, $|y'\rangle$, $|z'\rangle$ положительной или отрицательной чётности, которые мы обозначили как $|\Phi_{x'}^\pm\rangle$, $|\Phi_{y'}^\pm\rangle$, $|\Phi_{z'}^\pm\rangle$:

$$\begin{aligned} |\Phi_0^\pm\rangle &= |\Phi_{z'}^\pm\rangle, \\ |\Phi_\pm^\pm\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\Phi_{x'}^\pm\rangle \pm i|\Phi_{y'}^\pm\rangle). \end{aligned} \quad (8)$$

Состояния $|x'\rangle$, $|y'\rangle$, $|z'\rangle$ получаются из "кубических" блоховских сумм $|x\rangle$, $|y\rangle$, $|z\rangle$ вращением системы координат, совмещающим её с координатной системой с осью z' , параллельной оси [111] (см. рис. 15). Индексы \pm в формулах (7) и (8) относятся к чётным или нечётным функциям. Спиновые индексы в формулах (7) определены по отношению к оси z' , т.е. для квантования спина вдоль оси симметрии [111]. Краям запрещённой зоны (см. рис. 16) отвечают четыре состояния (7): функции $|\Phi_2^-\rangle$ и $|\Phi_1^+\rangle$ и их крамерсово-сопряжённые партнёры $\hat{K}|\Phi_2^-\rangle$ и $\hat{K}|\Phi_1^+\rangle$. Смешивание спиновых функций вследствие спин-орбитального взаимодействия контролируется зависящими от материала углами спинового смешивания θ^\pm , которые зависят от соотношения между матричными элементами кристаллического поля $\langle x|\hat{H}|y\rangle$, и величиной спин-орбитального взаимодействия. В работе [17] величины θ^\pm приведены в табулированном виде для всех полупроводников группы IV–VI. Волновые функции (7) служат базисом для эффективного гамильтонiana Дирака:

$$H = \begin{pmatrix} \varepsilon_g/2 & v_{||}\sigma_z p_z + v_{\perp}\boldsymbol{\sigma}_{\perp}\mathbf{p}_{\perp} \\ v_{||}\sigma_z p_z + v_{\perp}\boldsymbol{\sigma}_{\perp}\mathbf{p}_{\perp} & -\varepsilon_g/2 \end{pmatrix}, \quad (9)$$

где ε_g — ширина запрещённой зоны, $\mathbf{p}_{\perp} = (p_x, p_y)$, $\boldsymbol{\sigma}_{\perp} = (\sigma_x, \sigma_y)$ — вектор матриц Паули. Здесь и далее мы опускаем штрихи у координатных индексов, повсюду имея в виду "штриховую" систему координат, связанную с точкой L (см. рис. 15). Полезно выяснить физический смысл параметров $\cos\theta^\pm$. В результате простого вычисления средних значений реального спина $\mathbf{s} = (s_x, s_y, s_z)$ находим

$$\begin{aligned} \langle\Phi_2^-|s_z|\Phi_2^-\rangle &= \cos\theta^-, \quad \langle\hat{K}\Phi_2^-|s_z|\hat{K}\Phi_2^-\rangle = -\cos\theta^-, \\ \langle\Phi_2^-|s_{x,y}|\Phi_2^-\rangle &= 0, \\ \langle\Phi_1^+|s_z|\Phi_1^+\rangle &= -\cos\theta^+, \quad \langle\hat{K}\Phi_1^+|s_z|\hat{K}\Phi_1^+\rangle = \cos\theta^+, \\ \langle\Phi_1^+|s_{x,y}|\Phi_1^+\rangle &= 0. \end{aligned} \quad (10)$$

Таким образом, $\cos\theta^\pm$ — это величины спиновой поляризации вдоль оси [111] для состояний на краях запрещённой зоны в точке L.

5. Топологические поверхностные состояния и спиновая текстура

Для того чтобы получить поверхностные топологические состояния, надо решить неоднородную задачу с гамильтонианом Дирака (9) и граничным условием на поверхности. Соответствующее граничное условие, введённое в полной аналогии с моделью инверсного контакта, получило название "топологического граничного условия" [18, 19]. Это условие требует инверсии зон на поверхности, причём на стороне вакуума запрещённая зона стремится к бесконечности (рис. 17). Другими словами, поверхность описывается как инверсный контакт с вакуумом. Таким образом, ε_g в формуле (9) надо заменить некоторой функцией $\Lambda(z)$, которая совпадает с $\varepsilon_g/2$ в объёме, меняет знак на поверхности и обращается в бесконечность в вакуумном полупространстве. Имея в явном виде базисные функции (7), мы теперь можем аналитически рассчитать спиновую текстуру на поверхности [20].

Ниже мы рассмотрим наиболее простой случай поверхности (111). При этом необходимо учесть два дополнительных фактора, которые существенны для реальной поверхности. Во-первых, необходимо включить в рассмотрение изгиб зон, т.е. изменение работы выхода у поверхности. Это можно сделать с помощью скалярной функции $\varphi(z)$, которую следует добавить на диагональ матрицы гамильтониана (9). Во-вторых, необходимо учесть, что нормаль к поверхности неизбежно совпадает с осью симметрии [111] точки L, порождающей поверхностное состояние. Для поверхности (111) такое совпадение имеет место для "прямой" точки L₀, из которой происходит поверхностное состояние в Г, но не для трёх других точек L_{1,2,3}, ответственных за поверхностные зоны в точках M (см. рис. 10). Чтобы учесть это обстоятельство, следует изменить недиагональную часть матрицы (9):

$$v_{\parallel} \sigma_z p_z + v_{\perp} \sigma_{\perp} \mathbf{p}_{\perp} \Rightarrow \sigma R V R^{\dagger} (\mathbf{p}_{\perp} - i\hbar \mathbf{e}_z \partial_z) \equiv \Lambda. \quad (11)$$

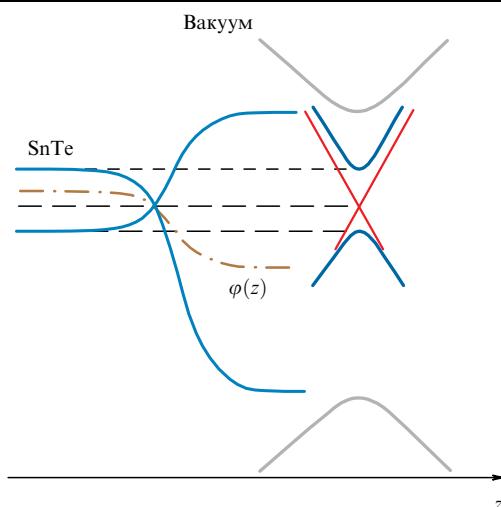


Рис. 17. Топологическое граничное условие для SnTe: инверсия зон, сопровождающаяся сдвигом центра запрещённой зоны (изгибом зон). В полупространстве на стороне вакуума запрещённая зона обращается в бесконечность. Центр конуса Дирака – Вейля лежит на линии нулевой энергии $\Lambda(z) = \varphi(z) = 0$. Показан случай изгиба зон вниз, наблюдаемый в SnTe, когда поверхностное состояние ограничено по энергии снизу.

Здесь $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$, V — диагональная матрица скоростей, $V = \text{Diag}(v_{\perp}, v_{\perp}, v_{\parallel})$, содержащая скорости в плоскости, перпендикулярной [111], и вдоль этой оси симметрии, \mathbf{e}_z — единичный вектор нормали к поверхности. Оператор вращений R осуществляет поворот координатной системы, связанной с точкой L (с осью z вдоль [111]), к новой ориентации, в которой z совпадает с нормалью к поверхности. Оператор R следует также применить и к базисным функциям (7). В случае М-долин R является просто вращением на угол β между двумя пространственными диагоналями куба [111], причём $\cos \beta = 1/3$. Уравнение Дирака принимает следующий вид:

$$\begin{pmatrix} \Lambda(z) + \varphi(z) & \Lambda \\ \Lambda^{\dagger} & \Lambda(z) + \varphi(z) \end{pmatrix} \Psi = \varepsilon \Psi. \quad (12)$$

Уравнение (12) решается аналогично тому, как это было сделано в работах [21, 22]. При предположении, что координатная зависимость $\Lambda(z) = \Lambda_0 f(z)$ и $\varphi(z) = \varphi_0 f(z)$ определяются одной и той же знакопеременной функцией $f(z)$, нетрудно показать [21, 22], что вследствие изгиба зон вейлевские поверхностные состояния оказываются ограниченными определённым интервалом энергий (что, в сущности, всегда наблюдается в численных расчётах и эксперименте).

Сначала мы рассмотрим более простой случай "прямой" L-точки, которая на поверхности проектируется в точку Г; мы также временно пренебрежём изгибом зон. В этом случае нет необходимости вращать систему координат и оператор Λ в уравнении (12) даётся левой частью равенства (11). Четырёхкомпонентная волновая функция топологического поверхностного состояния описывается уравнением (4):

$$\Psi_{\pm} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \exp \left[-i \left(\frac{\theta}{2} + \frac{\pi}{4} \right) \right] \\ \pm \exp \left[i \left(\frac{\theta}{2} + \frac{\pi}{4} \right) \right] \\ \exp \left[-i \left(\frac{\theta}{2} - \frac{\pi}{4} \right) \right] \\ \pm \exp \left[i \left(\frac{\theta}{2} - \frac{\pi}{4} \right) \right] \end{pmatrix}, \quad (13)$$

где мы опустили множитель, зависящий от z , а также часть, соответствующую плоской волне. Выражение (13) определяет коэффициенты разложения спинорной волновой функции Ψ_{\pm} по базисным функциям $|\Phi^i\rangle$ (7) зонных состояний в L-точке:

$$\Psi_{\pm} = \sum_i \Psi_{\pm}^i |\Phi^i\rangle. \quad (14)$$

Теперь мы можем вычислить средние значения проекций спина:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{\pm} | s_x | \Psi_{\pm} \rangle &= \mp s \sin \theta, \\ \langle \Psi_{\pm} | s_y | \Psi_{\pm} \rangle &= \pm s \cos \theta, \\ \langle \Psi_{\pm} | s_z | \Psi_{\pm} \rangle &= 0. \end{aligned} \quad (15)$$

В формулах (15) угол θ определяет направление импульса в плоскости поверхности, $\tan \theta = p_x/p_y$, а величина спина

$$s = \frac{1}{4} (\cos \theta^+ + \cos \theta^-). \quad (16)$$

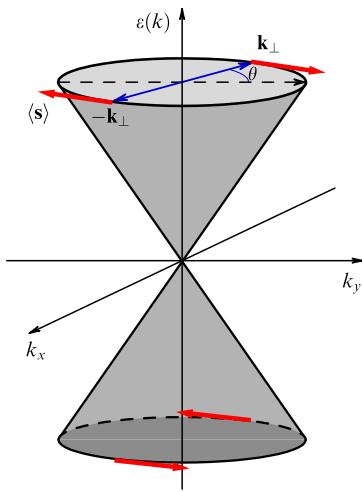


Рис. 18. Спин поверхностных состояний на конусе Дирака – Вейля для топологического состояния в Г-долине. Ветви спектра с положительной (отрицательной) энергией (киральностью) характеризуются противоположными направлениями спина.

Отсюда видно, что s контролируется параметрами объёмной зонной структуры, углами спинового смешивания θ^\pm , которые прямо связаны со спиновой поляризацией зонных состояний в точке L (10). В зависимости от углов смешивания амплитуда поверхностной спиновой текстуры (16) может менять знак и при определенных значениях θ^\pm обращаться в нуль. Согласно (15) вектор спина ориентирован перпендикулярно импульсу, следовательно, мы имеем обычную геликоидальную спиновую структуру (рис. 18). Однако это справедливо лишь для состояний в окрестности Г-долины. В более общем случае М-долины распределение спина является полем, тангенциальным к некоторому коническому сечению в плоскости (p_x, p_y) [20].

Для произвольной ориентации поверхности по отношению к оси симметрии [111] точки L и отличного от нуля изгиба зон вычисление даёт

$$\langle \Psi_\pm | \mathbf{s} | \Psi_\pm \rangle = \pm \begin{pmatrix} -a \sin \theta \\ b \cos \theta \\ m_z \sin \theta \end{pmatrix}, \quad (17)$$

где величины a , b и m_z зависят как от ориентации поверхности, так и от φ_0 . Для М-долины на поверхности (111) угол β между осью симметрии порождающей L-точки и нормалью к поверхности определяется равенством $\cos \beta = 1/3$. Ниже приведены формулы для произвольной ориентации поверхности:

$$\begin{aligned} a &= c \frac{v_x}{v_{\parallel}} \sin^2 \beta + b \frac{v_x}{v_{\perp}} \cos^2 \beta, \\ b &= s - \frac{\varphi_0}{2A_0} \left(\cos^2 \frac{\theta^-}{2} - \sin^2 \frac{\theta^+}{2} \right), \\ c &= 2b + \frac{\varphi_0}{A_0}, \\ m_z &= \sin(2\beta) \frac{1}{2} \left(c \frac{v_x}{v_{\parallel}} - b \frac{v_x}{v_{\perp}} \right). \end{aligned} \quad (18)$$

Конус Дирака – Вейля анизотропен:

$$\varepsilon(\mathbf{p}_\perp) = \gamma \sqrt{v_x^2 p_x^2 + v_{\perp}^2 p_y^2}, \quad (19)$$

где

$$v_x = \frac{v_{\parallel} v_{\perp}}{\sqrt{v_{\perp}^2 \sin^2 \beta + v_{\parallel}^2 \cos^2 \beta}} \quad (20)$$

и коэффициент

$$\gamma = \sqrt{1 - \frac{\varphi_0^2}{A_0^2}}. \quad (21)$$

Из формулы (19) очевидно, что анизотропия поверхностных состояний является следствием анизотропии скоростей в порождающей точке L. Напротив, для анизотропии спиновой текстуры более существенна различная спиновая поляризация L-точек. В самом деле, для симметричной точки Г спиновая текстура геликоидальна. При этом ось симметрии [111] и проекция спина в крамерсово-сопряженных L-состояниях параллельны нормали к поверхности. Для M-состояний ось симметрии L-долин наклонена к нормали. Это приводит к анизотропии текстуры и появлению компоненты спина, перпендикулярной к поверхности, даже в отсутствие анизотропии скоростей. Интересной особенностью выражений (18) является сильная зависимость спиновой текстуры от параметра изгиба зон φ_0 . Из формулы (21) видно, что если $|\varphi_0|$ превышает $|A_0|$, топологические состояния исчезают. В этом случае потенциал, определяющий наличие решения (4) эффективного уравнения Шредингера (совпадающего с уравнением суперсимметричной квантовой механики Виттена), к которому сводится уравнение (12) [21, 22], утрачивает знакопеременность. Для $|\varphi_0| < |A_0|$ топологические состояния существуют, но только в ограниченном интервале энергий. Предельные значения энергии определяются точками, в которых вейлевская ветвь спектра касается объемных зон, спроектированных на плоскость поверхности, т.е. взятых при нулевом значении проекции импульса на нормаль к поверхности. Для инверсного контакта двух полупроводников с конечной шириной запрещенных зон конус Дирака – Вейля ограничен как сверху, так и снизу. Предельные значения энергии даются выражением [21, 22]

$$\eta_{\pm} = - \left(\frac{A_0^2}{\varphi_0^2} - 1 \right) \varphi(\pm\infty). \quad (22)$$

В случае поверхности, когда эффективная щель на стороне вакуума обращается в бесконечность, ветвь топологических состояний ограничена снизу для $\varphi_0 > 0$, т.е. при изгибе зон вниз (рис. 19), или сверху, когда $\varphi_0 < 0$, т.е. при изгибе зон вверх. Мы определяем знак φ_0 и изгиб зон, полагая $f(-\infty) = 1$ на стороне материала и $f(+\infty) \rightarrow -\infty$ на стороне вакуума.

На рисунке 20 представлена эволюция спиновой текстуры топологических поверхностных состояний с изменением параметра изгиба зон φ_0 [20]. Спиновая поляризация рассчитана аналитически для поверхности (111) SnTe при использовании параметров зонной структуры из [17] для четырех значений φ_0/A_0 . В случае изгиба зон вниз, $\varphi_0 > 0$, который обычно реализуется в эксперименте [24], спиновые текстуры для долин Г и М подобны (рис. 20a), за исключением того, что в Г-долине геликоидальная структура практически идеальна, в то время как для М-долины она слабо деформирована. Числа кираль-

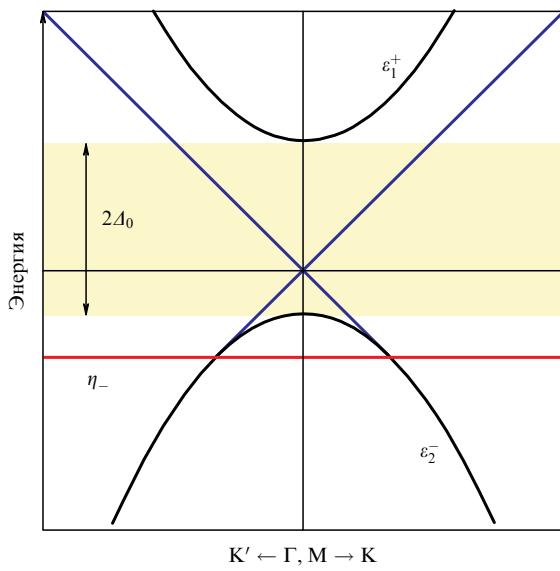


Рис. 19. Дисперсия топологических состояний в точках Г и М [23] в случае изгиба зон вниз. ε_1^+ и ε_2^- — проекции объемных L-зон на поверхность (111). Топологическое поверхностное состояние ограничено по энергии снизу значением η_- .

ности (winding numbers) для зоны проводимости (валентной зоны) равны -1 ($+1$). Абсолютная величина спина $s \approx 0,8\mu_B$ согласуется с вычислениями *ab initio*. Это довольно жесткий тест для теории, поскольку величина спина весьма чувствительна к поверхностному

изгибу зон. При изменении φ_0 спиновая текстура Г-состояний не меняет своего геликоидального характера, но спиновая амплитуда уменьшается и при выполнении условия

$$\frac{\varphi_0}{\Delta_0} = -\frac{\sin^2(\theta_+/2) - \cos^2(\theta_-/2)}{\sin^2(\theta_+/2) + \cos^2(\theta_-/2)} \quad (23)$$

полностью исчезает (для параметров SnTe из [17] получаем оценку критического значения $\varphi_0/\Delta_0 \approx -0,24$). При дальнейшем уменьшении φ_0 киральность меняет знак на противоположный. Для М-состояний изменение φ_0/Δ_0 имеет более драматические последствия. Как видно из рис. 20, спиновая текстура меняется начиная с геликоидальной с киральностью -1 (рис. 20а), проходя через линейную (рис. 20б) и гиперболическую (рис. 20в) и превращаясь в конце концов в деформированную геликоидальную с обратной киральностью $+1$ (рис. 20г). Кроме того, М-состояния обладают ненулевой проекцией спина, нормальной к поверхности, в согласии с результатами расчётов *ab initio* [15]. Величина нормальной компоненты приблизительно постоянна ($\approx 0,1\mu_B$), в то время как спиновая компонента в плоскости существенно больше для изгиба зон вниз ($\varphi_0 > 0$), чем для изгиба зон вверх ($\varphi_0 < 0$). Эти результаты ясно демонстрируют связь между топологическими состояниями на поверхности с объёмной зонной структурой. Кроме того, становится понятным, как можно управлять спиновой текстурой с помощью вариации объёмных параметров (например, в твёрдых растворах полупроводников IV – VI) или изменения изгиба зон на поверхности.

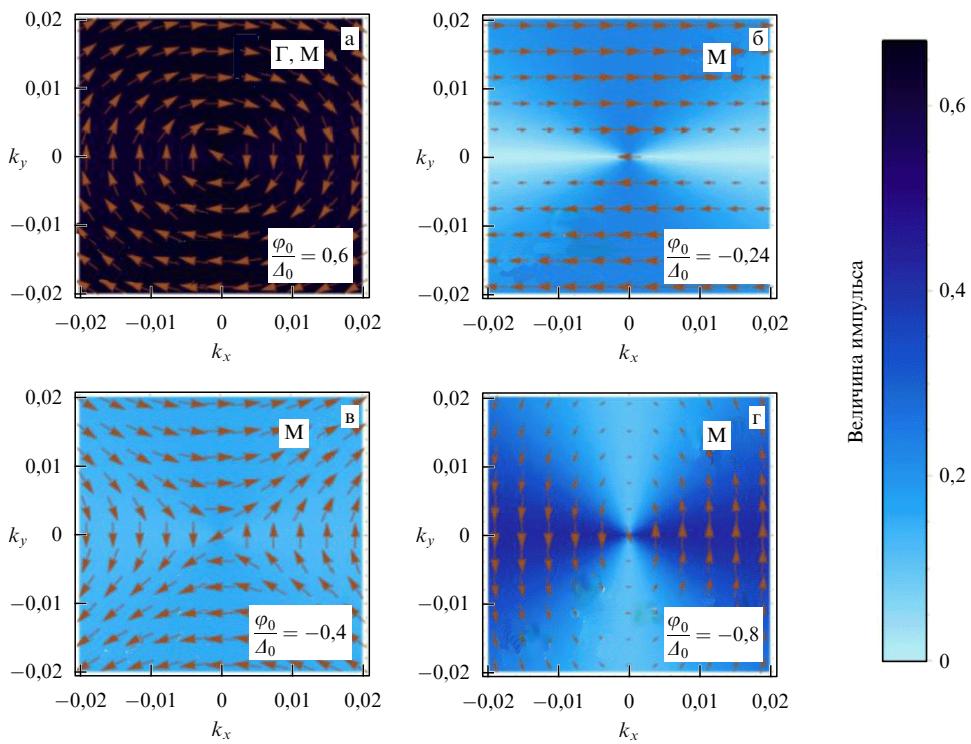


Рис. 20. Спиновые текстуры топологических состояний с положительной энергией на поверхности SnTe (111) [20]. Величины k_x , k_y определены в локальной системе координат М-долины (см. рис. 13). При изгибе зон вниз спиновые распределения (а) для долин Г и М подобны за исключением того, что для Г-долины текстура является идеально геликоидальной, а для М немного деформированной (на рисунке показана М-текстура). Различие становится существенным для изгиба зон вверх. Для Г-долины циркулярная симметрия строго сохраняется, хотя и меняет знак киральности на противоположный, в то время как М-текстура трансформируется в линейную (б), гиперболическую (в) и, наконец, в сильно деформированную циркулярную с противоположной киральностью (г).

6. Взаимодействие

Рудермана – Киттеля – Касуи – Иосиды на поверхности топологического изолятора

Как мы видели выше, на поверхности топологического изолятора всегда имеются специфические электронные состояния, содержащие киральный двумерный электронный газ. Естественным зондом, с помощью которого можно тестировать спиновую текстуру этого газа, может служить адсорбированный на поверхности магнитный атом. Хорошо известно, что погружённые в ферми-газ магнитные моменты взаимодействуют между собой посредством обмена виртуальными спиновыми возбуждениями — явление, известное как взаимодействие Рудермана – Киттеля – Касуи – Иосиды (РККИ). В обычном трёхмерном ферми-газе знак РККИ-взаимодействия осциллирует между ферро- и антиферромагнитным и само взаимодействие затухает с увеличением расстояния r между примесями как $\sin(2k_Fr)/r^3$, где k_F — фермиевское волновое число. Совершенно ясно, что нетривиальная спиновая структура топологического состояния должна проявиться в РККИ-взаимодействии.

Используя нашу аналитическую модель, мы рассчитали РККИ-взаимодействие на поверхности (111) SnTe [23]. Для простоты мы рассмотрим здесь лишь вклад Г-долины. Разделение долин Γ и M должно быть возможным в действительности, поскольку, как известно из эксперимента [13], в SnTe конические точки Дирака – Вейля в долинах M и Γ смешены друг относительно друга по энергии на величину порядка 170 мэВ. Поэтому, выбирая подходящий уровень Ферми, можно в принципе разделить вклады разных долин.

Для дальнейшего упрощения результатов мы рассмотрим ситуацию в отсутствие изгиба зон, $\varphi_0 = 0$. Используя функции Грина вейлевского гамильтониана (5), мы нашли [23], что энергия взаимодействия спинов S_1 и S_2 содержит различные произведения вида $S_1^i S_2^j$. Для дальнейшего мы выберем систему координат с осью x , проходящей через взаимодействующие магнитные атомы, и осью z , совпадающей с нормалью к поверхности. В энергии взаимодействия присутствуют члены $S_1^x S_2^x$,

$S_1^y S_2^y$, $S_1^z S_2^z$, благоприятствующие ферро- или антиферромагнитной ориентации спинов, а также вклад $S_1^x S_2^z - S_2^x S_1^z$, известный как взаимодействие Дзялошинского – Мории, которое стремится развернуть спины в плоскости xz так, чтобы они были перпендикулярны друг другу. Наша модель зонной структуры позволяет вычислить коэффициенты перед слагаемыми разного типа и таким образом определить, какая спиновая конфигурация является предпочтительной. В случае, когда уровень Ферми проходит через коническую точку спектра (т.е. в отсутствие свободных носителей), РККИ-взаимодействие имеет следующий вид:

$$E_{\epsilon_F=0} = \frac{A}{r^3} [a(2S_1^x S_2^x - S_1^y S_2^y) + 2bS_1^z S_2^z], \quad (24)$$

т.е. величина взаимодействия убывает как $1/r^3$. Коэффициенты a и b зависят от того, в какой подрешётке (Sn или Te) расположены взаимодействующие спины, т.е. от того, из атомов какого сорта состоит рассматриваемая поверхность (111). Вклад типа Дзялошинского – Мории появляется, когда в поверхностных зонах имеются носители:

$$E_{\epsilon_F \neq 0} = \frac{\pi A}{r^2} [\sin(2k_Fr)(aS_1^x S_2^x + bS_1^z S_2^z) - c \cos(2k_Fr)(S_1^x S_2^z - S_2^x S_1^z)]. \quad (25)$$

Как видно из уравнений (24), (25), РККИ-взаимодействие в топологической поверхностной зоне намного сложнее, чем в неполяризованном по спину ферми-газе. На рисунке 21а, б показаны равновесные конфигурации взаимодействующих спинов, расположенных на расстоянии x , возникающие в результате РККИ-взаимодействия на катионной (Sn) поверхности (111), в случаях соответственно SnTe и $Pb_{1-x}Sn_xTe$ с $x = 0,25$. Уровень Ферми выбран равным 0,1 эВ. На рисунке 21в показаны примеры спиновых конфигураций: конфигурации 1 и 2 относятся к классу спиновых состояний 1, а 3 и 4 — к классам спиновых состояний 2 и 3 соответственно. Обращает на себя внимание то, что уже небольшого изменения параметров при переходе от SnTe к $Pb_{0,25}Sn_{0,75}Te$ доста-

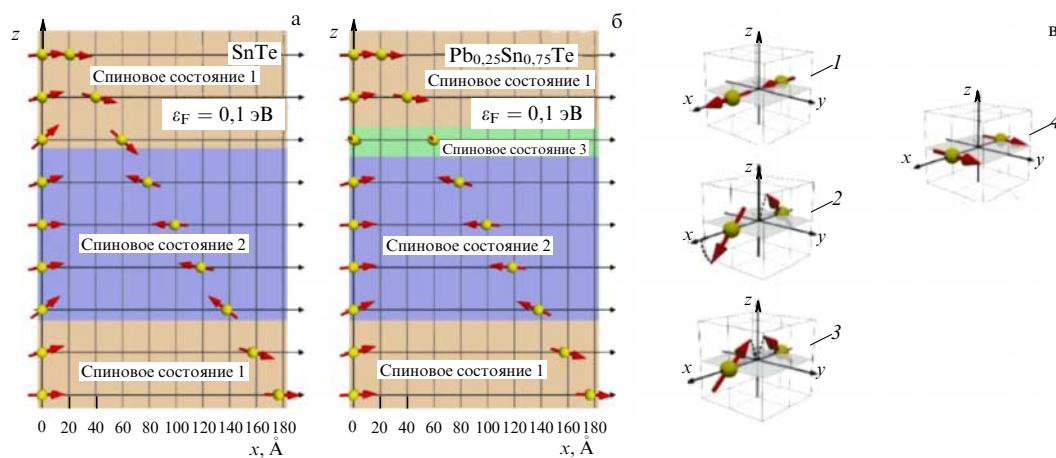


Рис. 21. РККИ-взаимодействие на поверхности (111), содержащей атомы Sn или Pb, для SnTe (а) и $Pb_{0,25}Sn_{0,75}Te$ (б). Показаны равновесные конфигурации взаимодействующих примесных спинов в зависимости от расстояния между ними [23]. Спины расположены на оси x ; энергия Ферми ϵ_F выбрана равной 0,1 эВ. Для SnTe существуют две качественно различные спиновые конфигурации: ферромагнитная с отклонением от строгой параллельности (спиновое состояние 1, примеры, относящиеся к этой конфигурации, показаны на рис. в — 1, 2) и не строго антипараллельная антиферромагнитная (3 на рис. в). Для $Pb_{0,25}Sn_{0,75}Te$ возникает новая конфигурация (спиновое состояние 3) с ферромагнитной ориентацией спинов вдоль оси y (4 на рис. в).

точно для того, чтобы появилась новая спиновая конфигурация, в которой оба спина ориентированы параллельно оси y (конфигурация 4 на рис. 21в).

7. Заключение

Инверсный контакт, который мы предложили в начале 1980-х годов [4], в сущности, является первым примером трёхмерного топологического изолятора. Как было осознано позднее, полупроводники с инверсной зонной структурой типа SnTe, на основе которых может быть реализован инверсный контакт, являются кристаллическими топологическими изоляторами.

Модель инверсного контакта позволяет лучше понять связь между топологически нетривиальной объёмной зонной структурой и топологическими поверхностными состояниями. Материалы типа SnTe предоставляют уникальную возможность проследить эту связь аналитически и тем самым выяснить, каким образом свойства поверхностного состояния изменяются при изменении объёмных параметров. Эта возможность обусловлена тем, что эффективный гамильтониан Дирака может быть получен аналитически из модели сильной связи для реальной зонной структуры соединений IV–VI. Феноменологически идея инверсного контакта недавно была использована для анализа поверхностных состояний в форме "топологического граничного условия" [18].

Однако полную информативную связь поверхности с объёмом можно установить только на основе микроскопического описания зонной структуры. Микроскопическое понимание соответствия объём–поверхность открывает возможность целенаправленно изменять спиновую текстуру поверхности посредством вариации параметров материала или поверхностного изгиба зон. Оно также даёт возможность рассчитать РККИ-взаимодействие магнитных примесей на поверхности топологического изолятора типа SnTe. Указанное взаимодействие оказывается гораздо более сложным, чем в случае "нормального" ферми-газа. Параметры этого взаимодействия непосредственно связаны с параметрами объ-

ёмной зонной структуры. Выяснение природы РККИ-взаимодействия на поверхности топологических изоляторов открывает новые возможности для дизайна поверхностных магнитных структур с помощью топологически защищённых поверхностных состояний.

Благодарности. Я глубоко признателен моим учителям и товарищам по работе покойным Ю.В. Копаеву и Б.А. Волкову, которые щедро делились своими знаниями и своим восхищением красотой физики. Эта статья посвящается их памяти. Я также благодарю Sam Shallcross и Nicolas Klier за совместную работу.

Список литературы

1. Hasan M Z, Kane C L *Rev. Mod. Phys.* **82** 3045 (2010)
2. Ando Y *J. Phys. Soc. Jpn.* **82** 102001 (2013)
3. Qi X-L, Zhang S-C *Rev. Mod. Phys.* **83** 1057 (2011)
4. Волков Б А, Панкратов О А *Письма в ЖЭТФ* **42** 145 (1985); Volkov B A, Pankratov O A *JETP Lett.* **42** 178 (1985)
5. Tchoumakov S et al. *Phys. Rev. B* **96** 201302(R) (2017)
6. Inhofer A et al. *Phys. Rev. B* **96** 195104 (2017)
7. Hsieh D Y et al. *Nature* **460** 1101 (2009)
8. Liu J, Duan W, Fu L *Phys. Rev. B* **88** 241303(R) (2013)
9. Fu L *Phys. Rev. Lett.* **106** 106802 (2011)
10. Teo J C Y, Fu L, Kane C L *Phys. Rev. B* **78** 045426 (2008)
11. Tanaka Y et al. *Nature Phys.* **8** 800 (2012)
12. Hsieh T H et al. *Nature Commun.* **3** 982 (2012)
13. Tanaka Y et al. *Phys. Rev. B* **88** 235126 (2013)
14. Yan C et al. *Phys. Rev. Lett.* **112** 186801 (2014)
15. Shi Y et al. *Phys. Rev. B* **90** 235114 (2014)
16. Волков Б А, Панкратов О А *ЖЭТФ* **75** 1362 (1978); Volkov B A, Pankratov O A *Sov. Phys. JETP* **48** 687 (1978)
17. Волков Б А, Панкратов О А, Сазонов А В *ЖЭТФ* **85** 1395 (1983); Volkov B A, Pankratov O A, Sazonov A V *Sov. Phys. JETP* **58** 809 (1983)
18. Zhang F, Kane C L, Mele E J *Phys. Rev.* **86** 081303(R) (2012)
19. Buczek R, Cywiński L *Phys. Rev. B* **85** 205319 (2012)
20. Klier N, Sharma S, Pankratov O, Shallcross S, arXiv:1702.08784
21. Pankratov O A, Pakhomov S V, Volkov B A *Solid State Commun.* **61** 93 (1987)
22. Pankratov O A *Semicond. Sci. Technol.* **5** S204 (1990)
23. Klier N, Sharma S, Pankratov O, Shallcross S, arXiv:1711.10760
24. Taskin A A et al. *Phys. Rev. B* **89** 121302(R) (2014)

Understanding surface states of topological insulators

O.A. Pankratov

University of Erlangen-Nürnberg, Staudstr. 7-B2, 91058 Erlangen, Germany
E-mail: Oleg.Pankratov@sau.de

Topological electron states were theoretically predicted by B.A. Volkov and O.A. Pankratov in 1985 as interface states in an inverted contact between IV–VI semiconductors with their bands mutually inverted. As became clear later, the ‘inverted’ SnTe semiconductor is a topological insulator, and the inverted contact is an example of a topologically nontrivial interface. This paper discusses the key results of Volkov and Pankratov’s 1985 work and examines the usefulness of the inverted contact model for explaining the close link between the topologically nontrivial bulk band structure and the topological surface states. An advantage of the model for getting a deeper insight into this link is that it allows for an analytical solution. An inhomogeneous semiconductor structure is described by an effective Dirac Hamiltonian, which was obtained analytically from a tight binding model for the band structure of IV–VI materials. This allows one to trace the relation between topological surface states and bands in the bulk. As a result, the spin texture of a topological state can be expressed explicitly in terms of the bulk characteristics. It turns out that the spin texture can be controlled by varying the surface band bending. Given the nontrivial spin polarization at the surface, it is interesting to take a look at the Ruderman–Kittel–Kasuya–Yosida (RKKY) interaction between magnetic adatoms, which can serve for probing the spin distribution locally. This interaction shows a much more complex structure than the common RKKY coupling in a non-polarized Fermi gas. The analytical theory provides an explicit relation between the RKKY interaction at the surface of a topological insulator and the parameters of the bulk spectrum.

Keywords: topological insulators, topological surface states, inverted contact, spin texture

PACS numbers: 73.20.–r, 73.40.Lq, 73.43.Cd

Bibliography — 24 references

Uspekhi Fizicheskikh Nauk **188** (11) 1226–1237 (2018)

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2017.12.038307>

Received 29 January 2018

Physics – Uspekhi **61** (11) (2018)

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNe.2017.12.038307>