

# ДИНАМИКА ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ И МАГНИТОПОГЛОЩЕНИЕ В ТРЕХМЕРНЫХ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ИЗОЛЯТОРАХ В КВАНТУЮЩЕМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

*Р. В. Туркевич<sup>a,b</sup>, Д. В. Хомицкий<sup>a\*</sup>*

<sup>a</sup> *Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского 603950, Нижний Новгород, Россия*

<sup>b</sup> *Институт прикладной физики Российской академии наук 603950, Нижний Новгород, Россия*

Поступила в редакцию 18 июня 2017 г.

Аналитически рассчитаны квантовые состояния, исследована динамика волнового пакета в магнитном поле и рассчитан коэффициент оптического поглощения для поверхностных состояний в трехмерных топологических изоляторах семейства  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ . Обнаружено качественное влияние гексагонального искажения спектра на структуру волновых функций на уровнях Ландау и его проявление в особенностях динамики волновых пакетов в квантующем магнитном поле, а также в частотной зависимости коэффициента оптического поглощения, где в зависимости от поляризации падающей волны в спектре поглощения появляются новые максимумы, отсутствующие в изотропной модели спектра. Обсуждаемые эффекты могут проявляться в оптических и транспортных экспериментах с топологическими изоляторами, что позволит более точно определить параметры их зонной структуры.

DOI: 10.7868/S0044451018020104

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Топологические изоляторы относятся к одним из наиболее интенсивно изучаемым в последнее десятилетие классам материалов. Это связано с особенностями их краевых состояний, энергия которых располагается в запрещенной зоне объемного материала, который обладает свойствами изолятора. Краевые же состояния, защищенные от рассеяния на немагнитных примесях требованиями симметрии относительно пространственной или временной инверсии, имеют линейный закон дисперсии низкоэнергетических электронных возбуждений, что отвечает безмассовым фермионам, или фермионам Дирака – Вейля. Исследованию топологических изоляторов посвящено большое число оригинальных работ, обзоров и монографий, в которых описаны многие их электронные, оптические и транспортные свойства [1–6], как найденные теоретически, так

и обнаруженные экспериментально [6–12], включая недавние результаты [13–15].

Большинство известных к настоящему времени топологических изоляторов принадлежат по геометрической классификации либо к двумерным материалам с одномерными краевыми состояниями, такими как краевые состояния в квантовой яме  $\text{HgTe}/\text{CdTe}$ , либо к трехмерным топологическим изоляторам с поверхностными состояниями, такими как поверхностные состояния в материалах семейства  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ . Построение моделей законов дисперсии краевых состояний в топологических изоляторах представляет в общем случае весьма сложную задачу, поскольку требует учета различных взаимодействующих между собой зон объемного материала, либо весьма детальных микроскопических расчетов, например, с использованием функционала плотности. При этом получающийся эффективный гамильтониан краевых состояний может содержать тот или иной набор слагаемых с различной симметрией, имеющих различный порядок малости. Для поверхностных состояний в трехмерном топологическом изоляторе вида  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ , рассматриваемых в

\* E-mail: khomitsky@phys.unn.ru

настоящей работе, одним из важных вопросов является симметрия закона дисперсии в  $\mathbf{k}$ -пространстве. Этот закон, в зависимости от применяемой модели, может иметь цилиндрическую симметрию, либо, при учете слагаемых третьего порядка по квазиимпульсу, демонстрировать эффекты гексагонального искажения, формирующие ось симметрии шестого порядка для закона дисперсии в отсутствие магнитного поля, и систему нелинейных по магнитному полю уровней Ландау [16–19]. Следует отметить, что в отличие от кубического члена наличие или отсутствие квадратичного, изотропного по направлению  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  слагаемого не оказывает влияния на симметрию закона дисперсии в  $\mathbf{k}$ -пространстве, и целесообразность его учета сводится в значительной степени к масштабу рассматриваемой области энергий. Линейное и кубическое слагаемые хорошо аппроксимируют экспериментальные данные о строении спектра в малых областях энергий по сравнению с шириной запрещенной зоны, что является основным энергетическим интервалом для нашей модели.

Вопрос об экспериментальной проверке той или иной модели спектра в топологических изоляторах, в частности, о значимости эффектов гексагонального искажения, к настоящему времени в значительной степени остается открытым. Наибольшее число экспериментальных результатов получено для двумерных топологических изоляторов на базе квантовых ям HgTe/CdTe [2–4, 10–15]. Для трехмерных материалов класса  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  есть данные о строении зонной структуры поверхностных состояний, полученные методом спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) [2–4, 7–9]. Они свидетельствуют о существенном присутствии гексагонального искажения в спектре, прежде всего, узкозонного материала, такого как  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ . Каким именно образом эффекты гексагонального искажения отразятся на экспериментально измеряемых свойствах, к настоящему времени ясно не в полной мере, хотя определенный прогресс в этом направлении наблюдается. Так, в материалах семейства  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  теоретически рассматривалось поведение оптической высокочастотной проводимости [20, 21]. Исследования таких материалов в магнитном поле включали построение моделей квантовых состояний [2, 6, 16–19, 22], также изучались осцилляции намагниченности [23], осцилляции Шубникова – де Гааза [24], в том числе экспериментально [25, 26].

Эффекты гексагонального искажения спектра могут проявляться различным образом, в том числе в динамике поверхностных электронных состояний, включая динамику в квантующем магнитном

поле. В этих задачах могут использоваться различные методы, в том числе представление динамики через эволюцию изначально локализованных волновых пакетов. Хорошо известно, что в системах с неэквидистантным спектром уровней Ландау динамика пакета демонстрирует интересные эффекты коллапса и возрождения на определенных временах, характеристики протекания которых могут дать полезную информацию об электронном спектре [27]. Такие эффекты наблюдались в ряде структур, в том числе в графене [28, 29]. Наличие гексагонального искажения влияет на такие топологические характеристики материала, как фаза Берри, что также было показано на примере квазиклассической динамики волновых пакетов в  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  [30]. Все это делает актуальным исследование динамики волновых пакетов в топологических изоляторах, помещенных и в сильное, квантующее магнитное поле, когда квазиклассический подход может быть неприменим, а особенности состояний, связанные с гексагональным искажением спектра, могут быть весьма существенны.

Еще одним проявлением гексагонального искажения спектра могут быть особенности частотной зависимости коэффициента поглощения электромагнитного излучения. Следует отметить, что к настоящему времени отсутствуют сведения о частотной зависимости коэффициента поглощения для волн различной поляризации в квантующем магнитном поле для материала  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ . Спектроскопические свойства уровней Ландау в топологических изоляторах являются важным источником сведений об их структуре и могут быть с высокой точностью измерены в экспериментах. Поэтому расчет таких свойств с целью определения значимости эффектов гексагонального искажения зонной структуры представляется своевременным.

Целью настоящей работы является исследование квантовых состояний в магнитном поле, циклотронной динамики волновых пакетов, сформированных из поверхностных состояний в  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ , и частотной зависимости коэффициента оптического поглощения. В каждой из этих задач основное внимание будет уделено качественным, симметричным эффектам, обобщенно называемым эффектами гексагонального искажения спектра, поскольку они происходят от соответствующего кубического по  $\mathbf{k}$  слагаемого в гамильтониане. Применяемые нами подходы позволяют провести все расчеты аналитически, что повышает достоверность полученных результатов и улучшает возможности их применения для различных материалов со свойствами топологиче-

ских изоляторов, принадлежащих семейству  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ .

Работа построена следующим образом. В разд. 2 рассматривается гамильтониан поверхностных состояний в топологических изоляторах семейства  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ , и обсуждается структура закона дисперсии, в том числе ее особенности, связанные с гексагональным искажением спектра. В разд. 3 аналитически рассчитываются состояния в квантующем магнитном поле в рамках теории возмущений по гексагональному слагаемому, исследуется его влияние на структуру волновых функций. В разд. 4 аналитически рассчитывается свободная динамика волновых пакетов, сформированных из поверхностных состояний в магнитном поле, и выявляются особенности траекторий и фурье-спектров для средних значений скорости пакета, отражающие присутствие гексагонального слагаемого в гамильтониане. В разд. 5 аналитически рассчитывается частотная зависимость коэффициента оптического поглощения для электромагнитных волн различной поляризации. Обсуждается качественный эффект появления новых пиков поглощения, отсутствующих в изотропной модели спектра. В заключительном разд. 6 приведено обсуждение полученных результатов и сформулированы выводы.

## 2. ГАМИЛЬТониАН ПОВЕРХНОСТНЫХ СОСТОЯНИЙ

Поверхностные состояния в трехмерных топологических изоляторах семейства  $\text{Bi}_2(\text{Se}_3/\text{Te}_3)$  описываются гамильтонианом [16, 17]

$$\mathcal{H} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \hbar v(k_x \sigma_y - k_y \sigma_x) + \frac{\hbar \lambda}{2}(k_+^3 + k_-^3) \sigma_z + \Delta \sigma_z. \quad (1)$$

Здесь  $m$  — эффективная масса, причем для  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  значение  $m < 0$ ,  $v$  — характерная скорость,  $\lambda$  — параметр гексагонального искажения,  $\sigma_i$  — матрицы Паули,  $k_{\pm} = k_x \pm i k_y$ ,  $k^2 = k_x^2 + k_y^2$ . Параметр  $\Delta$  определяет щель в энергетическом спектре при наличии, например, магнитного поля, ориентированного по оси  $z$ . В следующем разделе мы запишем для него явное выражение как для зеемановского слагаемого. В материале  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  параметры  $v = 3.8 \cdot 10^7$  см/с и  $\lambda = 3.7 \cdot 10^{-7}$  см<sup>3</sup>/с. Первое и второе слагаемые в гамильтониане (1) аналогичны тем, которыми описывается двумерный электронный газ со спин-орбитальным взаимодействием Рашба. Третье слагаемое, пропорциональное  $k^3$ , отвечает гексагональному искажению электронного спектра в плоскости

$k_x, k_y$ , эффекты от которого являются главной целью нашей работы. В дальнейшем мы пренебрежем первым слагаемым в (1). Этот шаг мотивирован следующими обстоятельствами. Рассматриваемые в работе эффекты сосредоточены в сравнительно узкой области энергий вблизи уровня Ферми в  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ . В этой области энергий, как свидетельствуют данные экспериментов по ARPES [3, 7–9], закон дисперсии с хорошей точностью описывается линейной зависимостью по  $\mathbf{k}$ . Учет квадратичного слагаемого с отрицательной эффективной массой привел бы к появлению обратной кривизны для закона дисперсии уже при небольших значениях волнового вектора. Такие особенности спектра в материале  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  к настоящему времени данными ARPES надежно не подтверждаются. В настоящей работе нас будут интересовать эффекты, связанные прежде всего с гексагональным искажением, обусловленные симметрией третьего слагаемого в (1). Первое же слагаемое (квадратичное по  $k$ ) обладает такой же осью симметрии, что и второе (линейное по  $k$ ) слагаемое, поэтому его учет не приведет к новым качественным изменениям в том интервале энергии, который мы рассматриваем. Наличие в спектре квадратичного по  $k$  слагаемого приводит к линейному слагаемому по  $n$  в спектре электрона в постоянном магнитном поле. Однако в том небольшом по сравнению с шириной зоны интервале энергий, который будет интересовать нас в дальнейшем, качественная картина уровней Ландау меняется не существенно, как это будет видно при рассмотрении спектра в следующем разделе. Также отметим, что учет этого слагаемого не приводит к новым правилам отбора для оптических переходов. Поэтому исключение первого слагаемого в (1) в нашей задаче допустимо.

При обсуждении законов дисперсии в топологических изоляторах можно упомянуть и недавнюю работу [31], в которой проводится исследование степени точности линейного закона дисперсии для краевых состояний в двумерном топологическом изоляторе на основе квантовых ям  $\text{HgTe}/\text{CdTe}$  с использованием различных моделей. В этой работе показано, что отклонения от линейного закона в области энергий вблизи уровня Ферми весьма невелики.

Спектр поверхностных электронных возбуждений с учетом описанного выше упрощения в полярных координатах  $(k, \theta)$  для зоны с положительной энергией имеет вид

$$E(k, \theta) = \sqrt{\hbar^2 k^2 v^2 + (\Delta + \hbar \lambda k^3 \cos 3\theta)^2}. \quad (2)$$

Первое слагаемое в подкоренном выражении описывает стандартный дираковский конус, второе

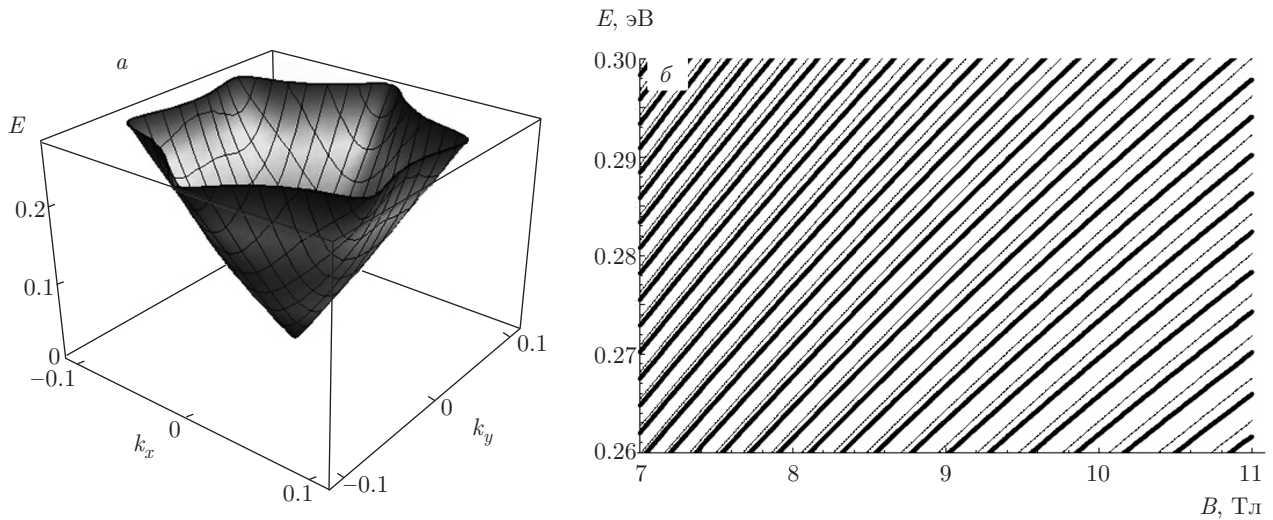


Рис. 1. а) Спектр гамильтониана (1) в отсутствие внешних полей, б) уровни Ландау с учетом гексагонального искажения (жирная линия) и без его учета (тонкая линия)

содержит параметр щели  $\Delta$  и пропорциональное  $\lambda$  слагаемое, описывающее гексагональное искривление. Спектр (2) в  $\mathbf{k}$ -пространстве показан на рис. 1а. Вторая зона с отрицательной энергией, описываемая выражением вида (2) со знаком минус перед квадратным корнем, не учитывается, поскольку во всех рассматриваемых нами эффектах взаимодействие между состояниями с положительной и отрицательной энергиями не проявляется.

Энергия Ферми  $E_F$  выбрана равной 0.28 эВ, что отвечает характерным значениям уровня Ферми для топологических изоляторов рассматриваемого типа. Как видно на рис. 1а, при таком выборе  $E_F$  в спектре наблюдается сильное гексагональное искажение в плоскости  $(k_x, k_y)$ , поэтому можно ожидать, что связанные с этим искажением эффекты будут существенны.

### 3. ГАМИЛЬТониАН В МАГНИТНОМ ПОЛЕ. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

Для исследований эффектов гексагонального искажения, проявляющихся, как это будет показано ниже, в динамике электронных состояний и оптическом поглощении, необходимо получить выражение для волновой функции электронных возбуждений во внешнем магнитном поле. Будем считать, что магнитное поле  $\mathbf{B}$  направлено по оси  $z$  и перпендикулярно поверхности топологического изолятора. Вклад магнитного поля в гамильтониан (1) мы учтем с помощью замены компонент квазиим-

пульса  $\hbar k_i$  на калибровочно инвариантное выражение  $\hbar k_i + (e/c)A_i$ , которое содержит компоненты векторного потенциала  $A_i = (By, 0, 0)$ ,  $e$  — заряд электрона. Введем операторы рождения и уничтожения по следующему правилу:

$$k_+ = \frac{\sqrt{2}}{l_H} \hat{a}, \quad k_- = \frac{\sqrt{2}}{l_H} \hat{a}^\dagger,$$

где  $l_H = \sqrt{\hbar c / eB}$  — магнитная длина. Операторы  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^\dagger$  удовлетворяют коммутационному соотношению  $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ . С использованием операторов рождения и уничтожения гамильтониан (1) запишем в виде суммы невозмущенного гамильтониана  $\hat{H}_0$  и оператора возмущения  $\hat{V}$ :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} = \begin{pmatrix} \Delta - i\epsilon_0 \hat{a}^\dagger \\ i\epsilon_0 \hat{a} - \Delta \end{pmatrix} + \gamma \begin{pmatrix} \hat{a}^{\dagger 3} + \hat{a}^3 & 0 \\ 0 & -\hat{a}^{\dagger 3} - \hat{a}^3 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Мы ввели следующие переменные:

$$\epsilon_0 = \frac{\sqrt{2}\hbar v}{l_H}, \quad \gamma = \frac{\sqrt{2}\hbar \lambda}{l_H^3}, \quad \Delta = -\frac{1}{2}g\mu_B B,$$

где  $\Delta$  — зеемановское слагаемое, которое содержит магнетон Бора  $\mu_B$  и  $g$ -фактор, который, согласно нашим оценкам для  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  в рамках многозонной модели, развитой в работе [17], равен 18. Спектр и волновые функции гамильтониана  $\hat{H}_0$  могут быть легко найдены:

$$E_n^{(0)} = \sqrt{\epsilon_0^2 n + \Delta^2}, \quad (4)$$

$$\Psi_n^{(0)} = \begin{pmatrix} \cos \theta_n |n\rangle \\ i \sin \theta_n |n-1\rangle \end{pmatrix}. \quad (5)$$

В этих выражениях

$$\operatorname{tg} \theta_n = \frac{E_n^{(0)} - \Delta}{\epsilon_0 \sqrt{n}},$$

$|n\rangle$  — функции осциллятора, а  $E_n^{(0)}$  взято со знаком плюс перед квадратным корнем, что соответствует зоне с положительной энергией, рассматриваемой в настоящей работе.

Используя (4) и (5), можно определить поправки к энергии и волновой функции в рамках теории возмущений от вклада в гамильтониан, связанного с гексагональным искажением спектра. Вычисляя матричные элементы оператора возмущения  $\hat{V}$ , получим, что отличны от нуля только матричные элементы  $V_{n\pm 3, n}$ . Поправки к энергии в первом порядке теории возмущений равны нулю, так как равны нулю диагональные матричные элементы. Поправка к  $n$ -му уровню Ландау, найденная во втором порядке теории возмущений, равна

$$E_n^{(2)} = \frac{|V_{n-3, n}|^2}{E_n^{(0)} - E_{n-3}^{(0)}} + \frac{|V_{n+3, n}|^2}{E_n^{(0)} - E_{n+3}^{(0)}}. \quad (6)$$

Матричные элементы определяются следующими выражениями:

$$\begin{aligned} V_{n-3, n} &= \\ &= \gamma \left( \sin \theta_{n-3} \sin \theta_{n-3} \sqrt{(n-2)(n-1)n} - \right. \\ &\left. - \cos \theta_{n-3} \cos \theta_{n-3} \sqrt{(n-3)(n-2)(n-1)} \right), \\ V_{n+3, n} &= \\ &= \gamma \left( \sin \theta_{n+3} \sin \theta_{n+3} \sqrt{(n+3)(n+2)(n+1)} - \right. \\ &\left. - \cos \theta_{n+3} \cos \theta_{n+3} \sqrt{(n+2)(n+1)n} \right). \end{aligned} \quad (7)$$

Поправки к волновым функциям первого и второго порядков равны

$$\begin{aligned} \Psi_n^{(1)} &= \frac{V_{n-3, n}}{E_n^{(0)} - E_{n-3}^{(0)}} \Psi_{n-3}^{(0)} + \frac{V_{n+3, n}}{E_n^{(0)} - E_{n+3}^{(0)}} \Psi_{n+3}^{(0)}, \\ \Psi_n^{(2)} &= \frac{V_{n-6, n-3} V_{n-3, n}}{(E_n^{(0)} - E_{n-6}^{(0)})(E_n^{(0)} - E_{n-3}^{(0)})} \Psi_{n-6}^{(0)} + \\ &+ \frac{V_{n+6, n+3} V_{n+3, n}}{(E_n^{(0)} - E_{n+6}^{(0)})(E_n^{(0)} - E_{n+3}^{(0)})} \Psi_{n+6}^{(0)} - \\ &- \left( \frac{|V_{n-3, n}|^2}{(E_n^{(0)} - E_{n-3}^{(0)})^2} + \frac{|V_{n+3, n}|^2}{(E_n^{(0)} - E_{n+3}^{(0)})^2} \right) \frac{\Psi_n^{(0)}}{2}. \end{aligned} \quad (8)$$

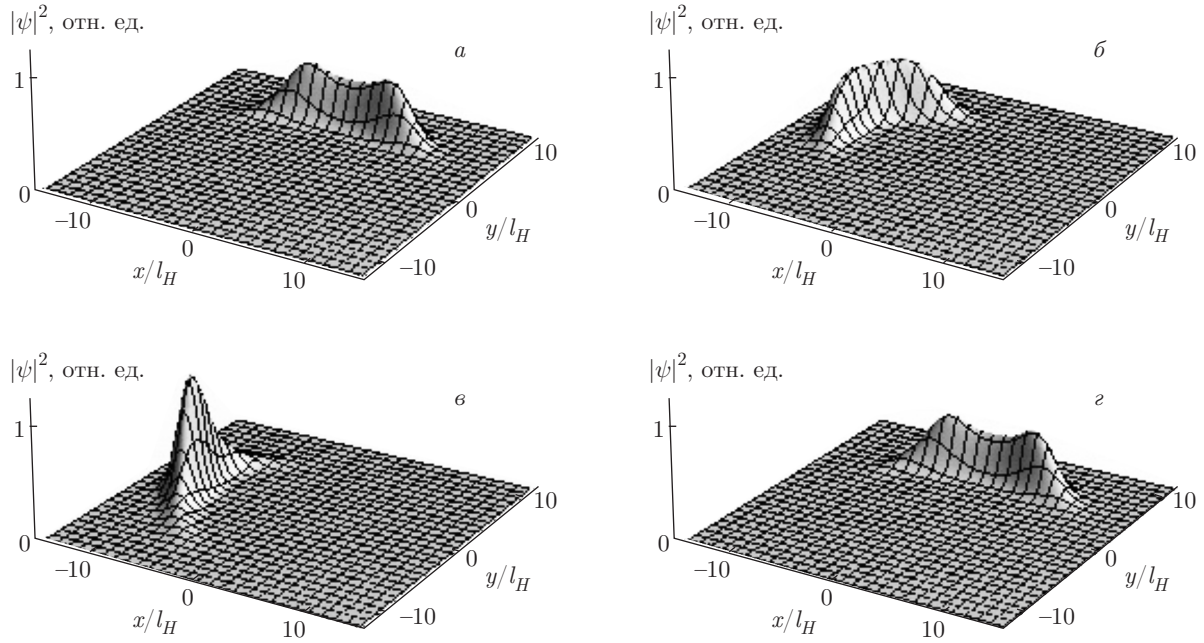
Энергия и волновые функции с учетом этих поправок равны  $E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(2)}$  и  $\Psi_n = \Psi_n^{(0)} + \Psi_n^{(1)} + \Psi_n^{(2)}$ . Следует отметить, что поправки к энергии начинают отличаться от нуля, начиная с 4-го уровня, а поправки к волновым функциям, соответствующим уровням Ландау, — с 7-го уровня. Фрагмент картины уровней Ландау приведен на рис. 1б. Отметим, что учет квадратичного слагаемого в гамильтониане (1), приводящий к линейному вкладу по  $n$  в закон дисперсии в магнитном поле, не приводит к сколько-нибудь существенным изменениям в картине уровней Ландау на том интервале энергий, который показан на рис. 1б. Это слагаемое также не дает вклада в изменение симметрии квантовых состояний, что позволяет не включать его в нашу модель.

Условие применимости теории возмущений для вычисления (8) состоит в малости кубического по волновому вектору слагаемого в гамильтониане (1) по сравнению с невозмущенным гамильтонианом без кубического слагаемого. Это условие может быть записано в виде неравенства, аналогично применяемому в [18], в форме

$$\lambda/l_H^3 \ll v/l_H. \quad (9)$$

Подставляя в (9) типичные параметры для магнитного поля, скорости электронов  $v$ , и амплитуды кубического слагаемого  $\lambda$ , мы убеждаемся, что значение левой части неравенства (9) составляет примерно 0.01 от значения  $v/l_H$ . Это позволяет говорить о допустимости применения теории возмущений. Также необходимо прокомментировать зависимость матричных элементов (7) от номера  $n$ . Из формул (7) следует, что матричные элементы растут с номером  $n$ , что уже наблюдалось при применении теории возмущений к подобным задачам [18]. Это обстоятельство, однако, не означает появления расходящихся рядов или иных плохо обусловленных выражений, поскольку суммирование по номеру  $n$  выражения (8) не предполагают. Индекс  $n$  определяет лишь «центр» разложения для волновой функции в наборе уровней Ландау, и для всех сумм (8) является фиксированным.

Из рис. 1б следует, что качественное изменение картины уровней Ландау при рассматриваемых нами энергиях и величинах магнитного поля по сравнению с моделью изотропного спектра не происходит. Сравнение с более точным численным расчетом уровней Ландау в рассматриваемой модели показывает, что погрешность в положении уровней, полученных по теории возмущений в рассматриваемой области значений параметров, не превыша-



**Рис. 2.** Вид волнового пакета в координатном пространстве в различные моменты времени в течение циклотронного периода: *a* — начальное состояние, соответствующее моменту времени  $t = 0$ ; *б* —  $t = T_{cl}/6$ ; *в* —  $t = T_{cl}/4$ ; *г* —  $t = T_{cl}$ . Классический период равен  $T_{cl} = 1.2 \cdot 10^{-12}$  с, магнитная длина  $l_H = 78 \text{ \AA}$

ет межуровневого расстояния. Однако более существенное влияние гексагональное искажение оказывает на волновые функции, что следует из выражения (8). Каждая волновая функция представляет собой суперпозицию осцилляторных функций с разными индексами  $n$ , и полученный набор осцилляторных функций приводит к формированию состояния, обладающего свойствами гексагональной симметрии, отражающей присутствие гексагонального искажения в спектре. Симметрия волновых функций проявляется как в динамике электронных состояний, так и в частотной зависимости коэффициента поглощения электромагнитного излучения. Исследованию этих задач посвящены два следующих раздела данной работы.

#### 4. ДИНАМИКА ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ

Для исследования особенностей свободной динамики электронных состояний в системе с гамильтонианом (3) в постоянном магнитном поле рассмотрим эволюцию во времени волнового пакета, составленного из состояний  $\Psi_n$  с энергиями  $E_n$ , близких к некоторому состоянию с квантовым числом  $n_0$ , и дисперсией  $\delta n$ . Такой волновой пакет может быть записан в виде

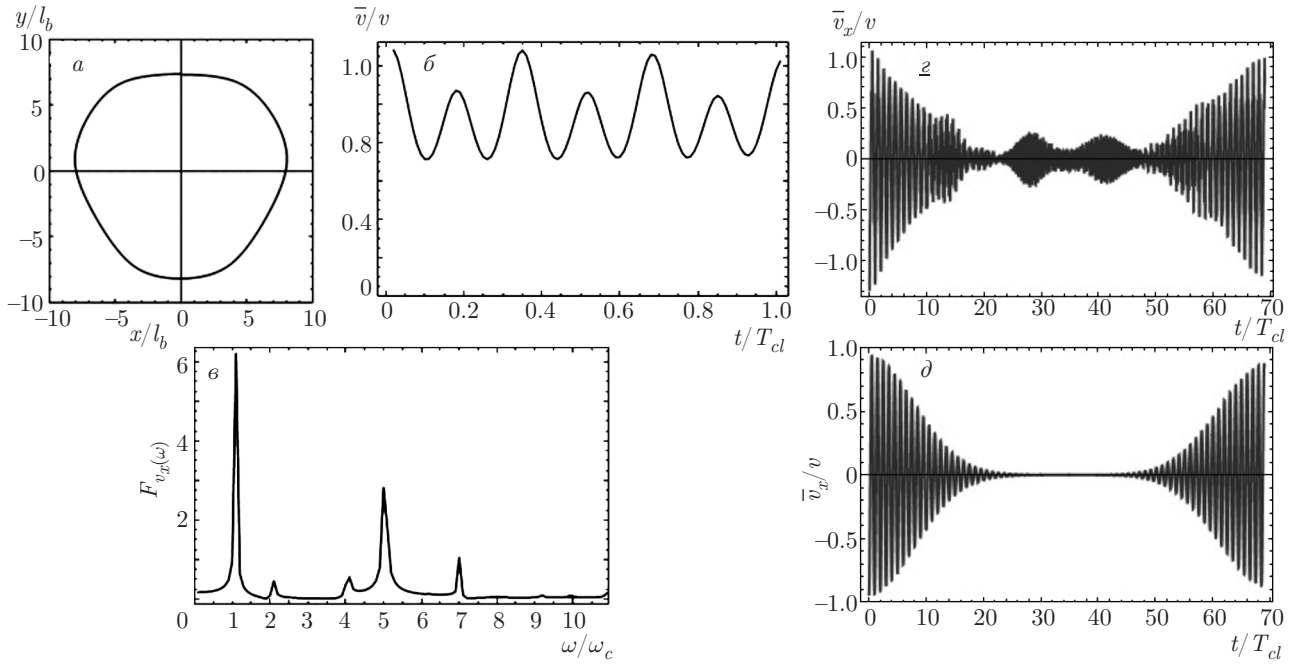
$$\psi(x, y, t) = \int dp \sum_n S_n(p) \Psi_n \times \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(E_n t - p_x x)\right), \quad (10)$$

где профиль огибающей

$$S_n(p) = \sqrt{\frac{l_H}{\pi \delta n}} \exp\left(-\frac{l_H^2(p - \hbar q)^2}{2\hbar^2} - \frac{(n - n_0)^2}{2\delta n^2}\right)$$

выбран аналогично использовавшемуся в работе [28]. Средний квазиволновой вектор  $q$  был выбран равным  $10^7 \text{ см}^{-1}$ , магнитное поле  $B = 10^5 \text{ Гс}$ ,  $n_0 = 40$  и  $\delta n = 2$ . Рассмотрим эволюцию волнового пакета (10) в течение циклотронного периода. Функция электронной плотности волнового пакета, полученная аналитически из выражения (10), в некоторые моменты времени изображена на рис. 2.

В начальный момент времени волновой пакет локализован на циклотронной орбите, и с течением времени происходит вращение волнового пакета вдоль орбиты с некоторой частотой  $\omega_c = 2\pi/T_{cl}$ . Во время вращения максимальная амплитуда волнового пакета осциллирует с частотой  $6\omega_c$ , а сама орбита представляет из себя замкнутую гексагонально деформированную линию. Наличие этих особенностей траектории является прямым следствием гексагонального искажения в электронном спектре.



**Рис. 3.** Траектория (а) и скорость (б) центра волнового пакета, определенные в течение циклотронного периода  $T_{cl}$ ; в — фурье-спектр  $x$ -проекции средней скорости. Циклотронная частота равна  $\omega_c = 5.4 \cdot 10^{12} \text{ с}^{-1}$ , средняя скорость  $\bar{v} = \sqrt{\bar{v}_x^2 + \bar{v}_y^2}$ ; г —  $x$ -компонента средней скорости  $\bar{v}_x$  на больших временах в модели с учетом гексагонального искажения; д — компонента скорости  $\bar{v}_x$  на больших временах в изотропной модели ( $\lambda = 0$ )

Проведя усреднение по пространству координат волновой функции, можно построить траекторию движения центра рассматриваемого волнового пакета и получить временную зависимость его скорости на интервале времени, равном циклотронному периоду  $T_{cl}$ . Применяв преобразование Фурье к компоненте средней скорости, например к  $\bar{v}_x$ , можно обнаружить в спектре гармоники циклотронной частоты. Результаты этих расчетов приведены на рис. 3.

Как видно на рис. 3а, траектория движения центра пакета представляет из себя замкнутую кривую, деформированную благодаря гексагональному искажению спектра. Скорость движения пакета возрастает на спрямленных участках траектории и снижается на изгибах, осциллируя при этом шесть раз за циклотронный период. Фурье-анализ скорости (см. рис. 3в) показывает наличие в спектре помимо основной частоты циклотронного движения  $\omega_c$  также некоторого набора ее гармоник. Этот набор представляется частотами  $(6 \pm 1)\omega_c$  и  $(3 \pm 1)\omega_c$ , и его наличие также отражает качественное влияние гексагонального искажения спектра на динамику электронных состояний.

Гексагональное искажение электронного спектра оказывает существенное влияние на динамику электронных волновых пакетов и на больших временах

$t \gg T_{cl}$  (рис. 3г). Для сравнения на рис. 3д приведена зависимость скорости  $\bar{v}_x$  от времени в течение 70 циклотронных периодов для изотропного случая ( $\lambda = 0$ ). Можно видеть, что гексагональное искажение вносит существенный вклад во временной профиль зависимости скорости центра пакета от времени, что может найти отражение в транспортных свойствах исследуемого материала. Следует отметить, что распад и возрождение волновых пакетов в системе с неэквидистантным спектром подробно описан в различных работах, например, в [27, 29]. Мы ограничимся установлением различий в динамике на больших временах между изотропной моделью и моделью с гексагональным искажением. На рис. 3г видно, что в отличие от изотропной модели во время распылывания волнового пакета на временах  $20T_{cl} < t < 50T_{cl}$  в осцилляциях скорости присутствуют дополнительные биения, отсутствующие в изотропной модели (рис. 3д). Причиной этих осцилляций является существенная анизотропия функции электронной плотности при распылывании, вызванная гексагональным искажением электронного спектра.

Обнаруженные особенности траектории пакета и его осцилляции могут проявляться в экспериментах по транспорту в структурах на базе топологических

изоляторов, что поможет дать ответ на вопрос о существенности гексагональных искажений спектров в рассматриваемых материалах.

### 5. ОПТИЧЕСКОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ

Эффекты гексагонального искажения спектра могут качественным образом проявиться в частотной зависимости коэффициента оптического поглощения. В случае изотропного спектра вида  $E(k) = \hbar kv$  при  $\lambda = 0$  для двумерной системы (1) в квантующем магнитном поле под действием электромагнитного излучения разрешен только один переход с  $\Delta n = 1$ . Учет в гамильтониане (1) слагаемых, пропорциональных  $\lambda$ , приводит к изменению спектра и симметрии волновых функций. Вследствие этого некоторые переходы, запрещенные в изотропном случае, будут теперь разрешены. Исследование зависимости коэффициента поглощения от частоты внешнего электромагнитного поля позволят прояснить, какие именно переходы возможны в гексагонально деформированной системе с гамильтонианом (1).

Пусть постоянное магнитное поле по-прежнему ориентировано перпендикулярно поверхности топологического изолятора,  $\mathbf{B} \parallel z$ . На поверхность падает циркулярно поляризованная электромагнитная волна, распространяющаяся вдоль магнитного поля. При этом вращающийся вектор напряженности электрического поля лежит в плоскости  $(x, y)$ . Используя замену  $\hbar k_i + (e/c)A_i$ , через векторный потенциал введем в гамильтониан (1) помимо постоянного магнитного поля, как это было сделано выше, и электрическое поле волны, которое имеет следующие компоненты:

$$\mathcal{E}_x = \mathcal{E}_0 \sin(\omega t), \quad \mathcal{E}_y = \mathcal{E}_0 \cos(\omega t).$$

Мы оставим только линейные по электрическому полю  $\mathcal{E}$  слагаемые. Получившийся гамильтониан запишем в виде суммы  $\hat{H} + \hat{V}$ , где роль невозмущенного гамильтониана теперь играет гамильтониан (3), содержащий только внешнее постоянное магнитное поле, а  $\hat{V}$  содержит только электрическое поле волны. Новый оператор возмущения  $\hat{V}$  запишем в виде

$$\hat{V} = \frac{v\hbar\mathcal{E}_0 e}{2\omega} \left( \hat{V}^+ e^{i\omega t} + \hat{V}^- e^{-i\omega t} \right), \quad (11)$$

где  $\hat{V}^+ = \sigma_y + \sigma_x/i$  и  $\hat{V}^- = \sigma_y - \sigma_x/i$  соответствуют правой и левой поляризациям. Матричные элементы оператора (11) вычисляются по волновым функциям  $\Psi_n$  гамильтониана (3), найденным по теории

возмущений и учитывающим в своей структуре наличие гексагонального искажения.

Вероятности переходов из состояния  $n$  в состояние  $n'$  под действием переменного электрического поля могут быть вычислены непосредственно. Они определяются матричными элементами  $\mathcal{V}_{n',n}$  оператора возмущения (11). Для правополяризованной волны отличны от нуля матричные элементы  $\mathcal{V}_{n+2,n}$  и  $\mathcal{V}_{n+5,n}$ , а для левополяризованной волны  $\mathcal{V}_{n+1,n}$ ,  $\mathcal{V}_{n+4,n}$  и  $\mathcal{V}_{n+7,n}$ .

Коэффициент поглощения электромагнитного излучения (поглощаемая в единице объема мощность), в зависимости от частоты электромагнитного поля и напряженности постоянного магнитного поля, описываемый выражением

$$\alpha^\pm = \frac{4\pi e^2 \hbar^2 v^2}{c\sqrt{\epsilon}\omega} \times \sum_{i,j} |\hat{V}^\pm|^2 \delta(E_j - E_i \pm \hbar\omega) (f(E_i) - f(E_j)), \quad (12)$$

где  $\epsilon$  — диэлектрическая проницаемость и  $f(E)$  — функция распределения Ферми, показан на рис. 4 при энергии Ферми  $E_F = 0.28$  эВ и температуре  $T = 77$  К. При таком выборе значений параметров резонансные переходы происходят вблизи уровня Ландау с номером  $n = 40$ . Помимо температуры мы также учли естественное уширение уровней из-за возможных неоднородностей структуры при моделировании дельта-функции в стандартной формуле для коэффициента поглощения. Мы выбираем величину уширения  $\delta\epsilon = 1$  мэВ, что отвечает допустимым значениям для современных гетероструктур. Эта величина удовлетворяет соотношению  $\delta\epsilon \ll \Delta\hbar\omega$ , где  $\Delta\hbar\omega \approx 10$  мэВ — типичное расстояние между уровнями Ландау. Таким образом, учет конечного уширения уровней не приводит к существенному искажению в считывании положений дополнительных пиков поглощения, возникающих из-за гексагонального искажения в модели спектра. Наличие дополнительных ненулевых матричных элементов оператора  $\hat{V}$ , обусловленных гексагональной симметрией, как это следует из структуры выражения (12), может приводить к появлению дополнительных пиков в спектре поглощения, что является основой для применения спектроскопического подхода для детектирования масштабов гексагонального искажения спектра. Следует отметить, что подобное влияние гексагонального слагаемого в гамильтониане на гармоники спектра энергии наблюдалось в нашей недавней работе [32], где при квазиклассическом рассмотрении динамики электрона на поверх-



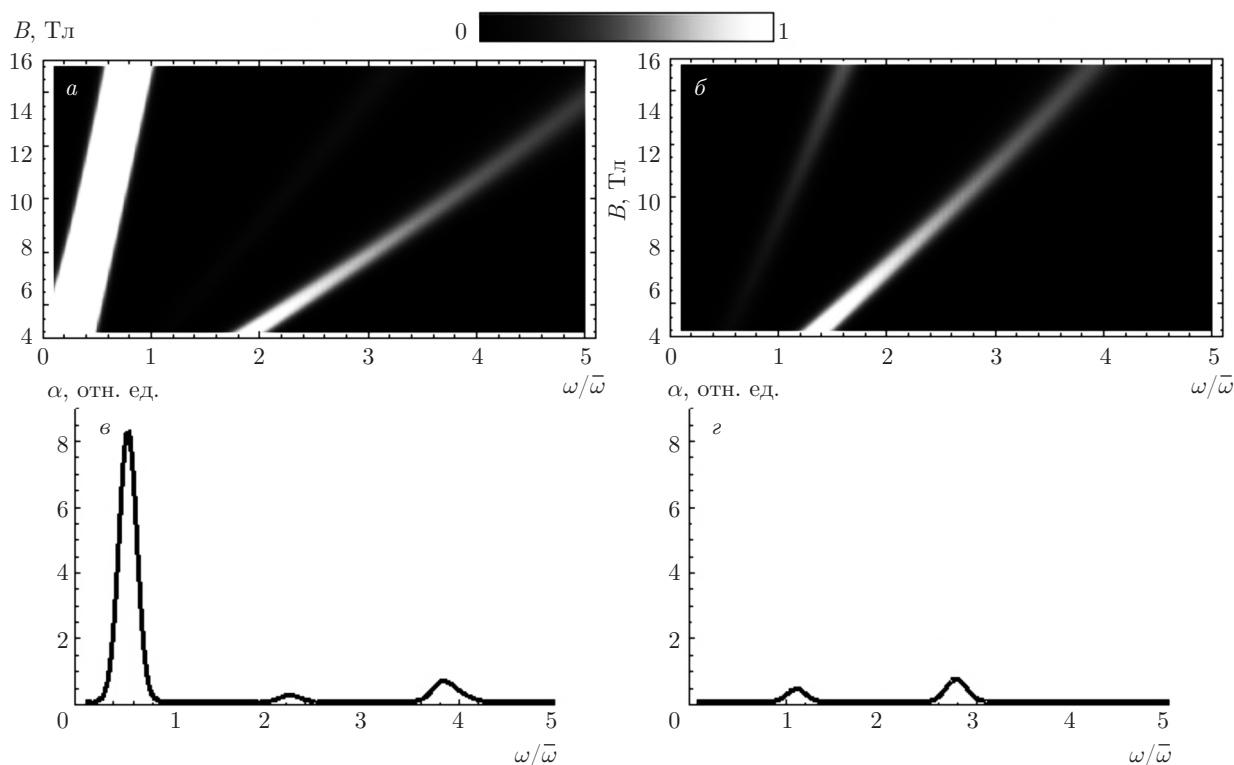


Рис. 4. Зависимости коэффициента поглощения  $\alpha$  от частоты падающей электромагнитной волны и величины квантующего магнитного поля для левополяризованной (а) и правополяризованной (б) волн; в, г — зависимости коэффициента поглощения от частоты при величине магнитного поля  $B = 10$  Тл соответственно для лево- и правополяризованной волны. Величина  $\bar{\omega} = 10^{13} \text{ с}^{-1}$

ности топологического изолятора  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  были обнаружены дополнительные пики, обусловленные гексагональным слагаемым.

Частота первого максимума коэффициента поглощения для левополяризованной волны при  $B = 10$  Тл соответствует переходу  $\Delta n = 1$  и равна  $5.4 \cdot 10^{12} \text{ с}^{-1}$  (рис. 4а, в). В случае падения на поверхность материала левополяризованной волны (рис. 4а, в), помимо перехода  $\Delta n = 1$  существуют еще два перехода  $\Delta n = 4$  на частоте  $2.2 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$  и переход  $\Delta n = 7$  при частоте  $3.85 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$ . В случае падения правополяризованной волны (рис. 4б, г) наблюдается переход с  $\Delta n = 2$  при частоте  $1.1 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$  и переход  $\Delta n = 5$  при частоте  $2.8 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$ .

Полученные правила отбора связаны с симметрией электронных состояний. В отсутствие магнитного поля спектр поверхностных состояний (2) обладает осью симметрии  $C_6$ . Наложение постоянного магнитного поля приводит к понижению симметрии до  $C_3$ . Эти оси симметрии определяют переходы на  $(6 \pm 1)$  и  $(3 \pm 1)$  уровней Ландау, в зависимости от поляризации волны, отсутствующие в изотроп-

ной модели спектра. Аналогичные правила отбора были получены в рамках квазиклассической модели в работе [32]. Таким образом, учет слагаемых с гексагональной симметрией в гамильтониане является существенным, поскольку приводит к качественным эффектам в частотной зависимости коэффициента поглощения, а именно, к появлению новых пиков для излучения с различной поляризацией, отсутствовавших в изотропной модели. Подобные эффекты могут наблюдаться в экспериментах по спектроскопии уровней Ландау для трехмерных топологических изоляторов.

### 6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе проведено аналитическое исследование квантовых состояний в магнитном поле, циклотронной динамики волновых пакетов, сформированных из поверхностных состояний в топологическом изоляторе  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ , и частотной зависимости коэффициента оптического поглощения. Основное внимание было обращено на качественные, симметричные эффекты, обобщенно называемыми эффектами

ми гексагонального искажения спектра, поскольку они происходят от соответствующего кубического по  $\mathbf{k}$  слагаемого в гамильтониане. Показано, что присутствие в спектре гексагонального искажения может приводить к ряду качественных особенностей в строении волновых функций. Во втором порядке теории возмущений мы рассчитали энергетический спектр и волновые функции поверхностных электронных состояний в трехмерных топологических изоляторах в квантующем магнитном поле. Обнаружено, что волновые функции  $\Psi_n$  содержат функции осциллятора с различными номерами, что отличается от решения для изотропной модели.

Проведенные аналитические исследования динамики волновых пакетов выявили ряд качественных эффектов, обусловленных гексагональным искажением спектра. Из полученных волновых функций был составлен волновой пакет с центром на 40-ом уровне Ландау, во внешнем магнитном поле 10 Тл. Было обнаружено, что в отличие от поведения волнового пакета в изотропной модели, волновой пакет в присутствии гексагонального искажения осциллирует шесть раз за циклотронный период. Центр волнового пакета при этом движется по гексагонально деформированной траектории. На спрямленных участках траектории происходит расплывание волнового пакета, а на перегибах траектории наблюдается его сжатие. В долговременной динамике происходят явления распада и возрождения волнового пакета. Наблюдаются качественные отличия от изотропной модели в зависимости скорости от времени при учете гексагонального искажения. Период возрождения составляет 70 классических периодов. Мы рассчитываем, что предсказанные нами эффекты в динамике пакетов могут проявиться в экспериментах. Аргументом в пользу этого является то, что эксперименты по исследованию распада и возрождения волновых пакетов успешно проводятся на атомах первой группы с использованием однофотонной и двухфотонной ионизации. Несмотря на существенное отличие электронной системы в кристаллах от атомной, явления распада и возрождения могут, по нашему мнению, проявляться и в экспериментах с трехмерными топологическими изоляторами.

Помимо динамики в постоянном магнитном поле мы исследовали частотную зависимость коэффициента поглощения в квантующем магнитном поле для случаев правополяризованной и левополяризованной электромагнитных волн. Наличие слагаемых третьей степени по  $\mathbf{k}$  в гамильтониане приводит к тому, что под действием циркулярно поляризованного электромагнитного излучения

помимо перехода на один уровень ( $\Delta n = 1$ ), который разрешен в изотропной модели для левополяризованной волны, при учете гексагонального искажения разрешены переходы на два ( $\Delta n = 2$ ) и на пять ( $\Delta n = 5$ ) в случае правополяризованной волны, и переходы на четыре ( $\Delta n = 4$ ) и семь ( $\Delta n = 7$ ) уровней в случае левополяризованной волны. На частотах, соответствующих этим переходам, наблюдаются локальные максимумы коэффициента поглощения. В расчетах коэффициента поглощения учитывалась температура, которая была равна  $T = 77$  К. Полученные результаты для коэффициента поглощения свидетельствуют о том, что гексагональное искажение электронного спектра при рассматриваемой энергии  $E_F = 0.28$  эВ существенно. Результаты работы позволяют рассчитывать на то, что связанные с ними новые максимумы поглощения могут быть обнаружены в экспериментах по спектроскопии уровней Ландау.

Авторы посвящают работу памяти В. Я. Демеховского, чей вклад в формирование интереса авторов к тематике исследования является определяющим. Разделы 1, 2 работы выполнены при финансовой поддержке РФФИ (грант № 16-57-51045-НИФ\_а). Разделы 3, 4, 5 работы выполнены в рамках проектной части Государственного задания Министерства образования и науки РФ (грант № 3.3026.2017/ПЧ).

## ЛИТЕРАТУРА

1. M. Z. Hasan and C. L. Kane, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 3045 (2010).
2. X.-L. Qi and S.-C. Zhang, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1057 (2011).
3. B. A. Bernevig, *Topological Insulators and Topological Superconductors*, Princeton University Press, Princeton, USA (2013).
4. *Topological Insulators. Fundamentals and Perspectives*, ed. by F. Ortman, S. Roche, and S. O. Valenzuela, Wiley-VCH Verlag, Weinheim, Germany (2015).
5. B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, *Science* **314**, 1757 (2006).
6. M. König, H. Buhmann, L. W. Molenkamp et al., *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 031007 (2008).
7. Y. L. Chen, J. G. Analytis, J.-H. Chu et al., *Science* **325**, 178 (2009).

8. C. Chen, S. He, H. Weng et al., Proc. Nat. Acad. Sci. USA **109**, 3694 (2012).
9. M. Nomura, S. Souma, A. Takayama et al., Phys. Rev. B **89**, 045134 (2014).
10. S. S. Krishtopenko, I. Yannik, D. B. But et al., Phys. Rev. B **94**, 245402 (2016).
11. A. V. Ikonnikov, S. S. Krishtopenko, O. Drachenko et al., Phys. Rev. B **94**, 155421 (2016).
12. A. Shuvaev, V. Dziom, Z. D. Kvon et al., Phys. Rev. Lett. **117**, 117401 (2016).
13. M. Marcinkiewicz, S. Ruffenach, S. S. Kristopenko et al., Phys. Rev. B **96**, 035405 (2017).
14. K.-M. Dantscher, D. A. Kozlov, M. T. Scherr et al., Phys. Rev. B **95**, 201103 (2017).
15. A. Inhofer, S. Tchoumakov, B. A. Assaf et al., arXiv:1704.04045.
16. L. Fu, Phys. Rev. Lett. **103**, 266801 (2009).
17. C.-X. Liu, X.-L. Qi, H. Zhang et al., Phys. Rev. B **82**, 045122 (2010).
18. E. V. Repin and I. S. Burmistrov, ЖЭТФ **148**, 584 (2015).
19. Y.-Y. Zhang, X.-R. Wang, and X. C. Xie, J. Phys. Cond. Mat. **24**, 015004 (2012).
20. Z. Li and J. P. Carbotte, Phys. Rev. B **87**, 155416 (2013).
21. X. Xiao and W. Wen, Phys. Rev. B **88**, 045442 (2013).
22. A. A. Taskin and Y. Ando, Phys. Rev. B **84**, 035301 (2011).
23. Z. Wang, Z.-G. Fe, S.-X. Wang et al., Phys. Rev. B **82**, 085429 (2010).
24. G. P. Mikitik and Yu. V. Sharlai, Phys. Rev. B **85**, 033301 (2012).
25. D.-X. Qu, Y. S. Hor, J. Xiong et al., Science **329**, 821 (2010).
26. A. Wolos, S. Szyszko, A. Drabinska et al., Phys. Rev. Lett. **109**, 247604 (2012).
27. И. Ш. Авербух, Н. Ф. Перельман, УФН **161**, 41 (1991).
28. E. Romera and F. de los Santos, Phys. Rev. B **80**, 165416 (2009).
29. В. Я. Демиховский, А. В. Тележников, Е. В. Фролова и др., ФНТ **39**, 26 (2013).
30. В. Я. Демиховский, Р. В. Туркевич, Письма в ЖЭТФ **101**, 501 (2015).
31. M. V. Entin, M. M. Mahmoodian, and L. I. Magarill, arXiv:1704.05635.
32. Р. В. Туркевич, В. Я. Демиховский, А. П. Протогенов, ФТП **51**, 1547 (2017).