

РАССЕЯНИЕ ВОЛНОВЫХ ПАКЕТОВ НА ПОВЕРХНОСТИ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ИЗОЛЯТОРОВ В ПРИСУТСТВИИ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ БАРЬЕРОВ С НАМАГНИЧЕННОСТЬЮ

*Д. В. Хомицкий**, *Д. А. Кулаков*

*Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского
603950, Нижний Новгород, Россия*

Поступила в редакцию 7 мая 2019 г.,
после переработки 2 сентября 2019 г.
Принята к публикации 3 сентября 2019 г.

На основе метода Кэли численно решается нестационарное уравнение Шредингера для волновых пакетов, образованных из поверхностных состояний на поверхности топологических изоляторов и рассеивающихся на потенциальном барьере, в том числе на барьере с намагниченностью. Рассчитываются коэффициент прохождения и распределения спиновой плотности. Найдены выражения для статического коэффициента прохождения через барьер с помощью приближения плоских волн и его обобщения для волновых пакетов. Показано, что двумерный характер волновых пакетов приводит к заметным различиям в поведении коэффициента прохождения по сравнению с задачей о рассеянии плоских волн. Так, для двумерных пакетов наблюдается существенное подавление эффекта клейновского туннелирования в некоторых областях энергии. Полученные результаты говорят о возможностях воздействия через потенциальные барьеры на туннелирование и спиновую плотность локализованных электронных состояний типа волновых пакетов в структурах на основе топологических изоляторов.

DOI: 10.31857/S0044451020010034

1. ВВЕДЕНИЕ

Управление электронными состояниями в топологических изоляторах [1–5] и подобных им структурах представляет собой важную задачу этого активно развивающегося раздела физики конденсированного состояния. Известно, что процессы распространения электронных состояний через такие структуры даже в присутствии немагнитных потенциальных барьеров, например, в графене [6, 7] протекают с существенными особенностями, вызванными линейным (или безмассовым) характером спектра как функции квазиимпульса при малых энергиях, для состояний, называемых фермионами Дирака. Так, при нормальном падении плоской волны на немагнитный барьер наблюдается эффект полного прохождения независимо от энергии волны, получивший название клейновского туннелирования.

Это явление рассматривалось для различных структур с бесмассовым спектром. Можно упомянуть некоторые работы для графена [7–10], а также для других систем с дираковским спектром [11–13], в том числе при наличии нестационарных барьеров [14]. Прохождение состояний вида плоских волн через поверхности топологических изоляторов и связанные с этим транспортные задачи изучались также и при наличии магнитных барьеров [15–23]. Основной особенностью влияния магнитных барьеров в цитированных выше работах является существенная модификация эффекта клейновского туннелирования, вплоть до его ослабления и исчезновения при определенных энергиях. Также необходимо отметить, что при наличии магнитных неоднородностей существенно изменяются транспортные и статистические свойства поверхностных состояний в топологических изоляторах [1, 2, 24, 25]. Таким образом, уже намечены пути к управлению электронными состояниями на поверхности топологических изоляторов с помощью барьеров, которые могут создавать конфайнмент. Упомянутые выше работы также объединяет подход, при котором электронные состояния рассматриваются в виде плоских

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

волн или их простых комбинаций, делокализованных в пространстве.

Следует отметить, что помимо исследования динамики и транспорта для состояний вида плоских волн представляют интерес и подобные задачи для локализованных электронных состояний на поверхности (или на краю) топологических изоляторов, имеющих при этом определенное направление движения и определенные проекции спина. Наиболее простым образом такие состояния описываются в терминах волновых пакетов. За последние годы проблемам динамики волновых пакетов в системах типа топологический изолятор или полупроводник, где важна роль спин-орбитального взаимодействия, уделялось значительное внимание. Свободная динамика таких пакетов исследовалась уже около 10 лет назад [26–28]. Кроме того, изучалась динамика релятивистских волновых пакетов, подчиняющихся уравнению Дирака [29], коллапс, возрождение волновых пакетов и осцилляции типа *zitterbewegung* [27, 30–32], эффекты фазы Берри в магнитном поле [33], а также динамика пакетов в графене в присутствии потенциала беспорядка [34]. Динамика одномерных краевых состояний под действием импульсов электрического поля в двумерном топологическом изоляторе изучалась в недавних работах [35–37]. Также рассматривались компактные объекты типа квантовых точек, сформированных на базе топологических изоляторов, в том числе две связанные квантовые точки [38]. Задача о динамике пакетов в локализованной на краю топологического изолятора квантовой точке исследовалась в нашей недавней работе [39]. Известно, что особенности линейного спектра в топологических изоляторах вместе с влиянием слагаемых высшего порядка с различной симметрией, таких как кубические члены в гамильтониане, приводят к появлению новых эффектов [40]. В частности, нами было обнаружено появление новых пиков в частотной зависимости коэффициента поглощения электромагнитного излучения и новых особенностей пространственной траектории циклотронного движения волновых пакетов [41]. Следует ожидать появления новых эффектов и в динамических задачах, таких как прохождение волновых пакетов через структуру с потенциальными барьерами, в том числе при наличии у барьеров постоянной намагниченности. Такая постановка вопроса приводит к необходимости построения как эффективной схемы численного решения нестационарного уравнения Шредингера для динамики волновых пакетов на поверхности топологических изоляторов с барьерами, так и сопутствующего

аналитического исследования, в той мере, в которой это допускают уравнения задачи.

В данной работе будет выполнено численное исследование динамики волновых пакетов на поверхности топологических изоляторов семейства Bi_2Te_3 в присутствии различных потенциальных барьеров, как неполяризованных, так и поляризованных (магнитных). Мы применяем вычислительную схему Кэли [42, 43] для решения нестационарного уравнения Шредингера, которая позволяет аппроксимировать оператор унитарной эволюции с высокой точностью. Будет рассмотрена динамика и коэффициенты прохождения для различных поляризаций барьера и различных углов среднего волнового вектора пакета с нормалью к барьеру. Также будет обсуждаться эволюция распределений спиновой плотности на плоскости в области вблизи барьера. В рамках аналитического подхода будет рассмотрена соответствующая статическая задача о рассеянии состояний на немагнитных и магнитных барьерах, результаты которой обобщаются на случай волновых пакетов, построенных из плоских волн. Вначале статическая задача решается нами для плоских волн, а затем полученный коэффициент прохождения используется для расчета прохождения их интегральной комбинации, дающей волновой пакет. Будет показано, что именно двумерный характер волновых пакетов приводит к существенным различиям в поведении коэффициента прохождения по сравнению с задачей о рассеянии плоских волн. Именно, наличие в двумерном волновом пакете плоских волн с различными проекциями волновых векторов относительно нормали к барьеру приводит к существенному подавлению эффекта клейновского туннелирования для налетающего на барьер пакета в определенном интервале энергий. Подобные особенности могут иметь существенное значение для создания схем управления электронными состояниями в структурах на основе топологических изоляторов, если в них возбуждаются состояния вида локализованных волновых пакетов.

Работа состоит из пяти разделов. В разд. 2 мы описываем модель поверхностных состояний в топологических изоляторах с барьерами и схему Кэли для моделирования динамики волновых пакетов. В разд. 3 обсуждаются основные результаты, полученные в рамках этой модели. В разд. 4 приводятся расчеты коэффициента прохождения для статической задачи, обсуждаются ее связи с динамической задачей. В заключительном разд. 5 сформулированы выводы.

2. ГАМИЛЬТониАН ЗАДАЧИ И СХЕМА РЕШЕНИЯ

Низкоэнергетическая часть спектра поверхностных состояний в трехмерных топологических изоляторах семейства Bi_2Te_3 может быть описана безмассовым гамильтонианом для фермионов Дирака вида [1–5]

$$H_0 = C + A(k_x\sigma_y - k_y\sigma_x). \quad (1)$$

Здесь C — начало отсчета энергии (точки Дирака) относительно спектра объемных состояний, значение которого зависит от выбора начала отсчета энергии в данной конкретной модели. Параметр $A = \hbar v_F$, где v_F — характерная скорость вблизи поверхности Ферми. Для топологического изолятора на базе Bi_2Te_3 значения параметров $v_F = 6.2 \cdot 10^7$ см/с (что отвечает $A = 406.8$ мэВ · нм) и $C = -0.18$ эВ [4, 5]. Спектр (1) определяет две ветви закона дисперсии:

$$\varepsilon_{1,2} = C \pm A\sqrt{k_x^2 + k_y^2}. \quad (2)$$

В дальнейшем мы будем отсчитывать энергию от точки Дирака поверхностных состояний с законом дисперсии (2). При моделировании состояний основной вклад вносит верхняя ветвь ε_1 закона дисперсии (2), поскольку в известных к настоящему времени экспериментах с топологическим изолятором на базе Bi_2Te_3 уровень Ферми был расположен в состояниях верхней ветви, где были обнаружены наиболее интересные эффекты [3, 4, 9, 23, 40]. Как следствие, нижняя ветвь спектра вносит пренебрежимо малый вклад в волновой пакет, построенный из состояний вблизи уровня Ферми.

Нашей целью является исследование динамики системы, в которой к гамильтониану (1) добавлено слагаемое, отвечающее потенциальному барьеру с пространственным профилем $f(x, y)$ и намагниченностью \mathbf{M} , локализованной в области барьера. Для постоянной в области барьера намагниченности функция $f(x, y)$ имеет вид локализованной ступеньки, отличной от нуля только внутри барьера. Влияние намагниченности в этом случае можно приближенно представить [1, 15, 17, 18, 21, 23] в виде обменного по форме оператора $(\mathbf{M} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = M_x\sigma_x + M_y\sigma_y + M_z\sigma_z$, описываемого в базисе состояний псевдоспина $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ для гамильтониана (1). Следует отметить, что несмотря на представление гамильтониана (1) в базисе псевдоспина, а не истинного спина, имеет место пропорциональность матриц $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ оператору истинного спина [5].

Полный гамильтониан задачи, таким образом, имеет вид $H = H_0 + f(x, y)(\mathbf{M} \cdot \boldsymbol{\sigma})$. Подобно приближению, принятому в работах [1, 15, 17, 18, 21, 23], этот гамильтониан записан с обменным слагаемым $f(x, y)(\mathbf{M} \cdot \boldsymbol{\sigma})$, обусловленным магнитным полем барьера, и не содержит векторного потенциала магнитного поля, генерируемого намагниченностью барьера, который использовался в ряде других работ со сходной постановкой задачи [16, 19, 22]. Такое приближение можно обосновать тем, что взаимодействие со спином налетающих на барьер состояний имеет локальный характер и сосредоточено целиком внутри области барьера с постоянной намагниченностью. Параметры барьера в гамильтониане, связанные со вторым слагаемым, являются управляющими параметрами задачи, наряду с энергией состояний, для которых рассматривается прохождение через барьер. Мы будем рассматривать барьеры с какой-либо одной компонентой намагниченности $\mathbf{M} = (M_x, M_y, M_z)$. Немагнитный барьер описывается единичной матрицей $\sigma_0 = \hat{E}$. Величина намагниченности будет учитываться нами в амплитуде U_0 пространственного профиля барьера $U(x, y)$, имеющей смысл энергии обменного взаимодействия, либо высоты немагнитного барьера при $\sigma_k = \sigma_0$. Это позволит записывать гамильтониан для барьера с намагниченностью вдоль x_k , где $k = x, y, z, 0$, в простой форме

$$H = H_0 + U(x, y)\sigma_k. \quad (3)$$

Мы не рассматриваем дополнительные члены для гамильтониана (3), связанные с рассеянием поверхностных состояний на дефектах, неоднородностях, а также на фонах. В качестве обоснования можно упомянуть, во-первых, изначальную устойчивость поверхностных состояний в топологических изоляторах к рассеянию на немагнитных примесях [1–4]. Во-вторых, мы рассматриваем задачу в относительно небольшой области вблизи потенциально барьера и с небольшим по сравнению с размером барьера волновым пакетом, что ограничивает весь пространственный масштаб задачи величинами порядка 0.2...0.4 микрона. С учетом высокого качества материалов, используемых при производстве топологических изоляторов [1, 2], такие размеры не превышают типичной длины свободного пробега электронов, что обосновывает пренебрежение в нашей задаче эффектами релаксации импульса и спина.

В этом разделе нашей целью является решение нестационарного уравнения Шредингера $i\hbar\partial\Psi/\partial t = H\Psi$ с гамильтонианом (3) при различных пара-

метрах барьера и налетающего на него волнового пакета. Для численного решения этого уравнения с аппроксимацией оператора эволюции во втором порядке точности по шагу временной дискретизации Δt удобной является схема Кэли [42, 43], в которой значение волновой функции — двухкомпонентного спинора

$$\Psi^{n+1}(x, y) = (\Psi_1^{n+1}, \Psi_2^{n+1})$$

на $n + 1$ -м шаге дискретизации по времени выражается через ее значение $\Psi^n(x, y)$ на n -м шаге с помощью следующего оператора:

$$\Psi^{n+1} = \frac{1 - iH\Delta t/2\hbar}{1 + iH\Delta t/2\hbar} \Psi^n. \quad (4)$$

Для практического применения схему (4) удобно переписать с помощью вспомогательной функции $\Phi(x, y)$:

$$\Psi^{n+1} = \Phi - \Psi^n, \quad (5)$$

где двухкомпонентная функция $\Phi(x, y) = (\Phi_1(x, y), \Phi_2(x, y))$ в каждой точке пространственной сетки (x, y) определяется как решение уравнения

$$\left(1 + \frac{iH\Delta t}{2\hbar}\right) \Phi = 2\Psi^n. \quad (6)$$

При использовании стандартных конечно-разностных аппроксимаций на пространственной сетке $(x = n_x\Delta x, y = n_y\Delta y)$ для операторов $k_i = -i\partial/\partial x_i$, входящих в гамильтониан (3), уравнение (6) переходит в систему линейных алгебраических уравнений для конечно-разностной аппроксимации функции $\Phi(n_x, n_y)$, через которую с помощью (5) определяются компоненты волновой функции $\Psi_{1,2}^n(n_x, n_y)$. Таким образом, для каждого момента времени $t = n\Delta t$ необходимо решить систему из $N_x \times N_y$ линейных уравнений, где $N_{x,y}$ определяют пределы покрытия области эволюции в пространственных координатах (x, y) .

Шаг по времени Δt в аппроксимации (4) выбирается нами, исходя из условия $(E\Delta t)/(2\hbar) \ll 1$, обеспечивающего устойчивость схемы Кэли. Применительно к типичным значениям средней энергии E , достигающей в наших расчетах нескольких сотен мэВ, это дает типичную величину $\Delta t \leq 10^{-15}$ с. Шаг по координатам $(\Delta x, \Delta y)$ выбирается, исходя из условия достаточного пространственного разрешения для структуры волнового пакета с типичной полушириной около 10 нм, что дает типичную величину $\Delta x(y) \leq 1 \dots 2$ нм.

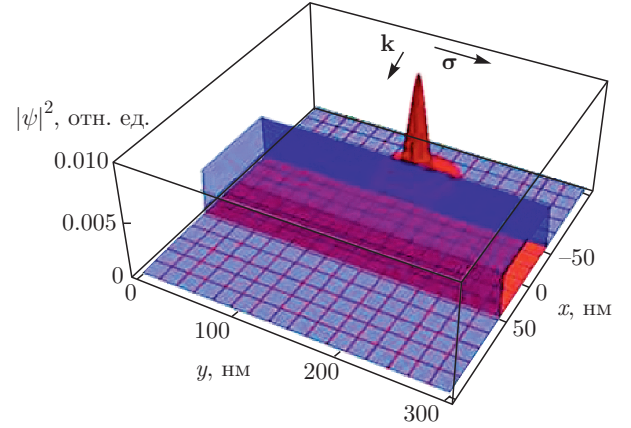


Рис. 1. Схема, показывающая исходное положение волнового пакета (7) с плотностью вероятности $|\psi|^2$ вблизи потенциального барьера-ступеньки, параллельного оси y и занимающего область вдоль оси x с $L = 100$ нм. Направление распространения пакета \mathbf{k} ориентировано вдоль оси y , начальная спиновая поляризация σ направлена вдоль y

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА ДИНАМИКИ ВОЛНОВОГО ПАКЕТА

Мы находим численное решение системы уравнений (5), (6) для начального состояния, представляющего собой с точки зрения пространственного профиля волновой пакет, локализованный по обеим координатам в плоскости (x, y) :

$$\Psi(x, y) = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} \exp\left\{-\frac{(x-x_0)^2}{2\Delta x^2} + i\bar{k}_x x\right\} \times \exp\left\{-\frac{(y-y_0)^2}{2\Delta y^2} + i\bar{k}_y y\right\}. \quad (7)$$

Компоненты $C_{1,2}$ спинорной части (7) определяют начальную спиновую поляризацию волнового пакета, координаты (x_0, y_0) задают его начальное положение, а значения (\bar{k}_x, \bar{k}_y) определяют средний волновой вектор пакета, который налетает на барьер под углом $\theta = \arctg(\bar{k}_y/\bar{k}_x)$. Значение модуля среднего волнового вектора связано со средней энергией пакета E через закон дисперсии (2). Для собственных состояний гамильтониана (1) направление распространения в плоскости (k_x, k_y) задает и спиновую поляризацию (S_x, S_y) , перпендикулярную волновому вектору [1–5].

Наиболее простым случаем, важным с практической точки зрения, является прохождение через потенциальный барьер-ступеньку, занимающий конечную область $[-L/2, L/2]$ вдоль оси x и прости-

рающийся вдоль оси y , т. е. моделирование барьера функцией

$$U(x, y) = U_0, \quad -L/2 < x < L/2, \quad (8)$$

и равной нулю в остальных точках плоскости. Схематически исходное положение пакета вида (7) относительно барьера, рассматриваемое в наших расчетах, показано на рис. 1. Мы используем типичное значение полуширины пакета $\Delta x = \Delta y = 10$ нм, а ширины барьера варьируются в диапазоне $L = 50 \dots 200$ нм. На рис. 1 для удобства восприятия показан барьер с $L = 100$ нм. Направление распространения пакета \mathbf{k} здесь ориентировано вдоль x перпендикулярно барьеру, начальная спиновая поляризация σ состояний, составляющих волновой пакет, направлена вдоль y , т. е. $\sigma_y(t = 0) = 1$. При этом коэффициенты двухкомпонентного спинора в (7) могут быть выбраны, например, в виде $(C_1, C_2) = (1, i)/\sqrt{2}$.

Вначале мы рассмотрим случай нормального падения на барьер, т. е. при $\theta = 0$, при этом начальная спиновая поляризация пакета будет направлена по оси y . Параметры барьера будут такими: амплитуда $U_0 = 300$ мэВ, ширина $L = 200$ нм. В качестве первой функции, характеризующей рассеяние пакета, мы рассмотрим коэффициент прохождения как функцию средней энергии пакета E , определяемой средними значениями компонент волнового вектора (\bar{k}_x, \bar{k}_y) в начальном состоянии (7). Коэффициент прохождения $T(E)$ мы определяем вначале через амплитуду волновой функции $\Psi = (\Psi_1, \Psi_2)$ пакета, прошедшего через барьер:

$$T(E) = \frac{\int |\Psi(x > L/2, t = t_1)|^2 dx dy}{\int |\Psi(x < -L/2, t = t_0)|^2 dx dy}. \quad (9)$$

Интегрирование в (9) ведется в области справа от барьера для прошедшей части пакета при $t = t_1$ и слева от барьера для налетающего пакета при $t = t_0$, где t_0 и t_1 — моменты времени соответственно начала и окончания взаимодействия пакета с барьером. В процессе численного решения задачи эти моменты времени определяются при непосредственном моделировании эволюции по схеме Кэли.

Остановимся на определении моментов времени t_0 и t_1 более подробно. Начиная с работы Бюттикера и Ландауэра [44] известны способы определения времени взаимодействия с барьером, применяемые для задачи о туннелировании массивной частицы. Также можно вводить время туннелирования, зная линейный размер проходимой пакетом области взаимодействия с барьером и характерную скорость пакета, как это обсуждалось, например, в работе [45].

Для системы с безмассовым гамильтонианом, как в нашей задаче, второй способ представляется оптимальным. В самом деле, с учетом того, что для спектра (2) модуль групповой скорости всех состояний с различным по модулю волновым вектором одинаков и равен фермиевской скорости v_F , можно дать простую оценку для интервала взаимодействия $\Delta t = t_1 - t_0$ пакета с барьером:

$$\Delta t = \frac{L + L_{wp}}{v_F}. \quad (10)$$

В (10) L — ширина барьера, а L_{wp} — характерный размер волнового пакета, связанный с параметром полуширины $\Delta x(y)$ в (7) соотношением $L_{wp} = p\Delta x$, где p — множитель, определяющий то расстояние от центра пакета, на котором уже есть заметный с вычислительной точки зрения вклад в плотность вероятности. В нашей модели мы выбрали $p = 5 \dots 6$, что обеспечивает учет всей области с существенно ненулевой плотностью вероятности. Учитывая, что нами рассматривались узкие по сравнению с шириной барьера ($L = 200$ нм) пакеты с $\Delta x(y) = 10$ нм, мы получим, что пространственный параметр в (10) $L + L_{wp} = 300 \dots 320$ нм. Принимая во внимание значение фермиевской скорости $v_F = 6.2 \cdot 10^7$ см/с, мы получим для времени (10) значение порядка $(4.8 \dots 5.1) \cdot 10^{-13}$ с. Мы брали всегда наибольшее из времен. Момент времени t_0 начала взаимодействия пакета с барьером определялся нами по достижению центром пакета расстояния $L_{wp} = p\Delta x$ до начала барьера. Момент времени t_1 может быть определен после вычисления (10) как $t_1 = t_0 + \Delta t$.

Скажем еще несколько слов о наблюдении эффектов, связанных с туннелированием дираковских электронов. Для практического применения выражения (9), например, в экспериментах по электронному транспорту, можно представить расположенные слева и справа от барьера детекторы локальной электронной плотности, фиксирующие налетающий и прошедший через барьер заряд (число электронов), сформированные волновым пакетом. Более детальное описание возможных здесь экспериментов, однако, выходит за рамки данной работы.

Мы рассматривали несколько магнитных поляризаций барьера в гамильтониане (3), а также неполяризованный барьер, когда матрица Паули в (3) равна σ_0 , т. е. единичной матрице. На рис. 2а показана зависимость коэффициента прохождения (9) от средней энергии пакета для трех типов поляризации барьера: σ_0 (немагнитный барьер), σ_x и σ_z . Видно, что для всех поляризаций барьера энерге-

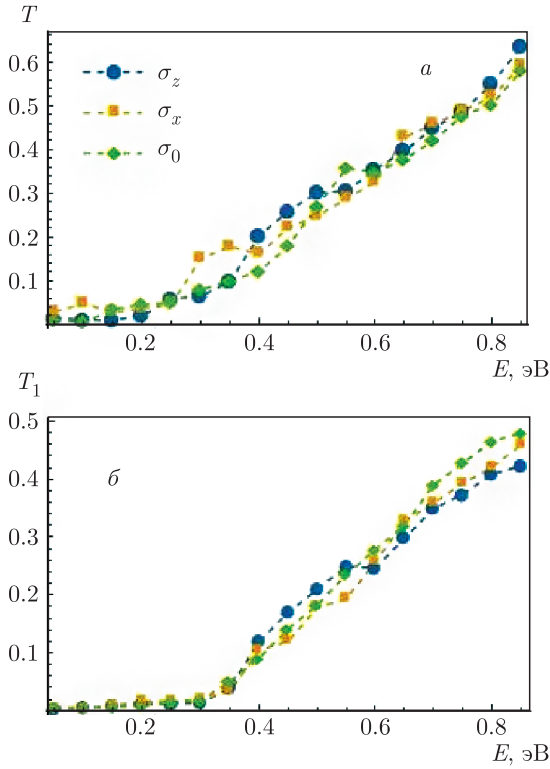


Рис. 2. *a)* Зависимость коэффициента прохождения (9) от средней энергии волнового пакета (7) для рассеяния на барьере (8) с шириной $L = 200$ нм и амплитудой $U_0 = 300$ мэВ, для разных типов направления намагниченности барьера (σ_0 — немагнитный барьер, σ_x, σ_z — магнитные барьеры), при нормальном падении на барьер; *б)* то же для коэффициента прохождения в форме (12)

тическая зависимость коэффициента прохождения в целом схожая. Тем не менее различия в коэффициенте прохождения составляют от 10% до 50% в области энергий $E > U_0$, отвечающей надбарьерному прохождению. Такие различия являются значимым фактором для потенциальных приложений в схемах со спиновым фильтром, когда прохождение зависит от поляризаций налетающего состояния и барьера. Интервал для средней энергии волнового пакета на рис. 2*a* и для последующих расчетов мы взяли в достаточно широких пределах, до 0.85 эВ. Для такой максимальной энергии следует ожидать перекрытия зон краевых и объемных состояний в топологических изоляторах семейства Bi_2Te_3 [1–4]. Мы сохранили подобный энергетический интервал в расчетах с целью расширить наше моделирование на возможно большую область параметров, включая среднюю энергию пакета.

Коэффициент прохождения через барьер можно определить и иначе, следуя, например, подходу,

развитому для задачи о безмассовых фермионах в графене в работе [8]. Именно, можно сопоставлять плотность потока в прошедшем и падающем на барьер состоянии, т. е. анализировать среднее значение оператора скорости $v_x = \partial H / \hbar \partial k_x$. Для гамильтониана (1)–(3) это приводит к выражению

$$v_x = \frac{A}{\hbar} \sigma_y, \tag{11}$$

а вместо формулы (9) для коэффициента прохождения мы получим схожее по структуре выражение

$$T_1(E) = \frac{\int \Psi^+(x > L/2, t = t_1) v_x \Psi(x > L/2, t = t_1) dx dy}{\int \Psi^+(x < -L/2, t = t_0) v_x \Psi(x < -L/2, t = t_0) dx dy}. \tag{12}$$

Энергетическая зависимость для коэффициента прохождения в форме (12) показана на рис. 2*б*. Можно видеть, что она во многом схожа с графиком для коэффициента в форме (9) на рис. 2*а*. Это можно объяснить доминирующей y -проекцией спина в падающем на барьер волновом пакете, благодаря чему распределения плотности вероятности и y -компоненты спиновой плотности близки друг к другу. Поскольку, как это будет показано ниже, при туннелировании через магнитный барьер может происходить поворот спина, значение y -компоненты спина в прошедшем состоянии может дать меньшее значение коэффициента (12) по сравнению с коэффициентом (9). Можно заметить подобное снижение амплитуды коэффициента прохождения на рис. 2*б* по сравнению с рис. 2*а*, особенно существенное для низких энергий $E < U_0$, отвечающих подбарьерному прохождению.

Анализируя результаты на рис. 2 для обоих подходов (9) и (12) к определению коэффициента прохождения, следует отметить существенное отличие рассеяния двумерных волновых пакетов на электростатическом барьере-ступеньке (при $\sigma_k = \sigma_0$) от рассеяния на аналогичном барьере состояний вида плоских волн [7, 9, 16]. В последнем случае при нормальном падении плоской волны наблюдается эффект клейновского туннелирования, при котором коэффициент прохождения равен единице независимо от энергии падающей волны и высоты барьера. Этот же эффект можно ожидать и для одномерных волновых пакетов, волновые вектора для которых располагаются вдоль прямой с ориентацией $(k_x, 0)$. Для двумерного волнового пакета вида (7) данный эффект в чистом виде, т. е. со значением коэффициента прохождения $T = 1$, не имеет

места. Действительно, такой волновой пакет собран из многих плоских волн с различной ориентацией волнового вектора относительно нормали к барьеру. Клейновское туннелирование с $T = 1$ наблюдается для нормального падения лишь для бесконечно узкого в плоскости (k_x, k_y) вклада от участка волновых векторов вида $(k_x, 0)$, что не может дать существенного вклада в коэффициент прохождения для всего волнового пакета. Этим объясняется характер зависимости $T(E)$ на рис. 2, которая не достигает единицы даже для немагнитного, т. е. электростатического барьера. Подобная особенность свойственна именно прохождению двумерных волновых пакетов, и может иметь важное значение при дальнейших исследованиях и приложениях их транспортных свойств.

Кроме энергетической зависимости коэффициента прохождения представляет интерес также его угловая зависимость, построенная при какой-либо фиксированной средней энергии пакета. На рис. 3а приведен пример такой зависимости для барьера ширины $L = 200$ нм и амплитудой $U_0 = 300$ мэВ, при падении на него волнового пакета со средней энергией $E = 600$ мэВ, рассчитанной по формуле (9). На рис. 3б,в приведены примеры угловых зависимостей, полученных с использованием выражения (12), причем на рис. 3в средняя энергия пакета равна значению 1 эВ, большему по сравнению с графиками на рис. 3а,б. Для всех случаев видно, что по мере роста угла падения, отсчитываемого в радианах от нормали к барьеру, коэффициент прохождения убывает. Для энергии $E = 600$ мэВ он становится весьма малым уже при углах около $\theta = \pi/4$ (рис. 3а,б), а для энергии $E = 1$ эВ область малых значений сдвигается вправо (рис. 3в). Обращает на себя внимание тот факт, что полученная угловая зависимость качественно схожа для барьеров с любой поляризацией, в том числе для немагнитного, т. е. электростатического барьера (кривая с индексом σ_0 на рис. 3). Такое быстрое убывание коэффициента прохождения в отличие от рассеяния на барьере состояний вида плоских волн [7,9,16] также обусловлено двумерным характером волнового пакета в нашей задаче, для которого отдельные составляющие его плоские волны входят с разными проекциями волнового вектора. При данном значении угла θ для среднего волнового вектора пакета эти составляющие могут быть ориентированы к нормали для барьера под значительно большими углами, чем θ . Это объясняет более быстрое убывание коэффициента прохождения для двумерного пакета. Такие особенности угловой зависимости коэффициента прохож-

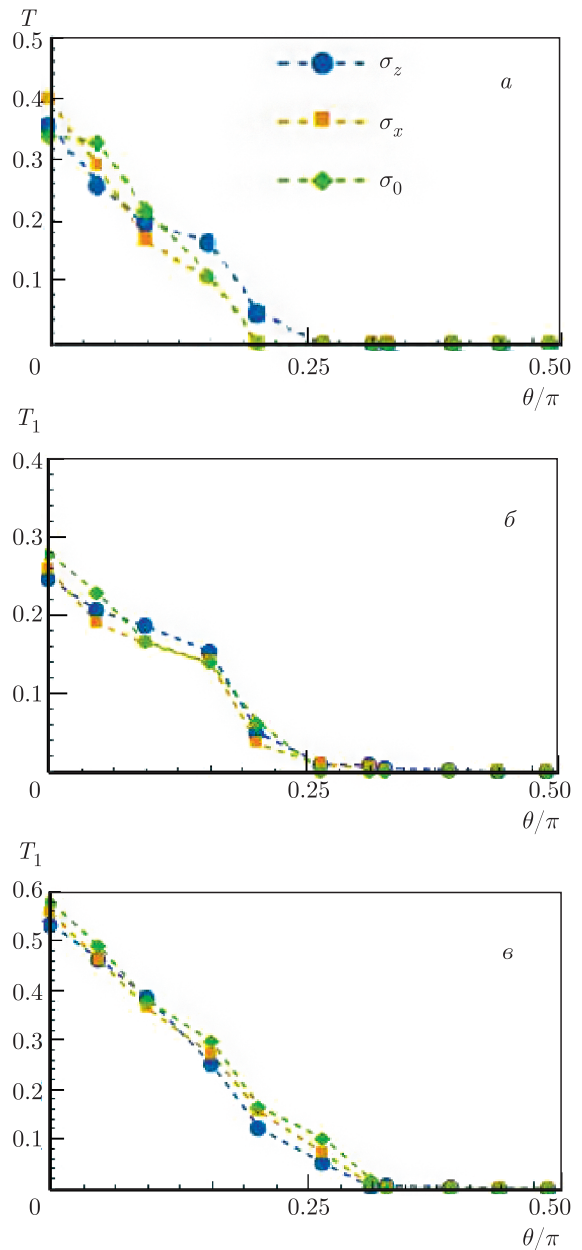


Рис. 3. а) Угловая зависимость $T(\theta)$ коэффициента прохождения (9) для барьера с шириной $L = 200$ нм и амплитудой $U_0 = 300$ мэВ при падении на него волнового пакета со средней энергией $E = 600$ мэВ, показанная для различных поляризаций барьера; б) то же для угловой зависимости коэффициента $T_1(\theta)$ из (12); в) то же для коэффициента прохождения в форме (12) при средней энергии пакета $E = 1$ эВ

дения также позволяют говорить о более эффективном механизме конфинмента двумерных волновых пакетов на поверхности топологических изоляторов по сравнению с одномерными пакетами или состояниями вида плоских волн.

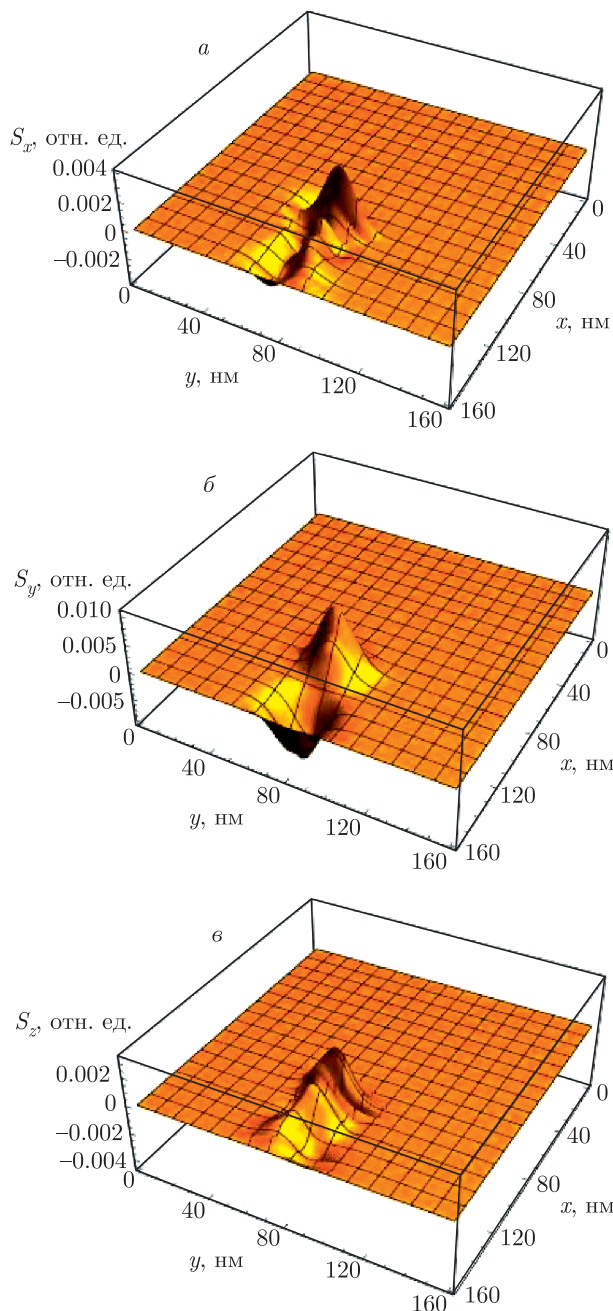


Рис. 4. Распределение компонент спиновой плотности $S_x(x, y)$, $S_y(x, y)$ и $S_z(x, y)$, сформировавшихся после взаимодействия волнового пакета со средней энергией 250 мэВ с барьером высотой 130 мэВ и шириной $L = 60$ нм. Барьер поляризован вдоль оси z . Начальное распределение спиновой плотности отвечало поляризации вдоль оси y . Наличие намагнитченности у барьера приводит к появлению двух компонент спиновой плотности $S_x(x, y)$ и $S_z(x, y)$, отсутствовавших у исходного пакета

Помимо коэффициента прохождения представляет интерес воздействие барьера на спиновую плотность налетающего волнового пакета. Можно ожидать, что магнитный барьер будет поворачивать спин в процессе прохождения пакета, что позволит говорить о воздействии на спиновую степень свободы при туннелировании через барьер. На рис. 4 показано распределение компонент спиновой плотности $S_x(x, y)$, $S_y(x, y)$ и $S_z(x, y)$, сформировавшихся после взаимодействия волнового пакета со средней энергией 250 мэВ с барьером высотой 130 мэВ и шириной $L = 60$ нм. Барьер поляризован вдоль оси z , что обеспечивает эффективный поворот спина из его первоначального положения в плоскости, образованной средним волновым вектором пакета (по оси x) и исходным вектором среднего спина (по оси y). Начальное распределение спиновой плотности в волновом пакете, напоминаем, отвечает поляризации вдоль оси y , т. е. из трех функций компонент спиновой плотности до взаимодействия с барьером была отлична от нуля лишь $S_y(x, y)$. Из рис. 4 можно сделать вывод, что наличие намагнитченности у барьера приводит к появлению двух остальных компонент спиновой плотности $S_x(x, y)$ и $S_z(x, y)$, отсутствовавших у исходного пакета.

Если волновой пакет рассеивается на немагнитном барьере, картина распределения спиновой плотности после взаимодействия с барьером меняется. На рис. 5 показано распределение спиновой плотности, аналогичное показанному на рис. 4, но для взаимодействия пакета со средней энергией 400 мэВ с немагнитным барьером шириной $L = 70$ нм и с амплитудой $U_0 = 100$ мэВ. Как и следовало ожидать, доминирующей по амплитуде остается та компонента спиновой плотности (в нашем примере S_y), которую волновой пакет имел до взаимодействия с барьером. Остальные компоненты спиновой плотности хотя и приобрели ненулевую амплитуду, но по сравнению с S_y остаются на порядок меньшими, к тому же их среднее значение по плоскости xy , как это следует из рис. 5, близко к нулю. Таким образом, эффективный поворот спина может быть достигнут лишь при наличии намагнитченности у барьера.

Можно сделать вывод, что выявлен механизм изменения спиновой плотности волнового пакета на поверхности топологического изолятора, т. е. локальное управление спиновой степенью свободы, с помощью потенциальных барьеров с намагнитченностью. Подобный механизм для топологических изоляторов с их жестким характером связи спина с направлением движения является, по нашему мнению, полезным инструментом для будущих приложений

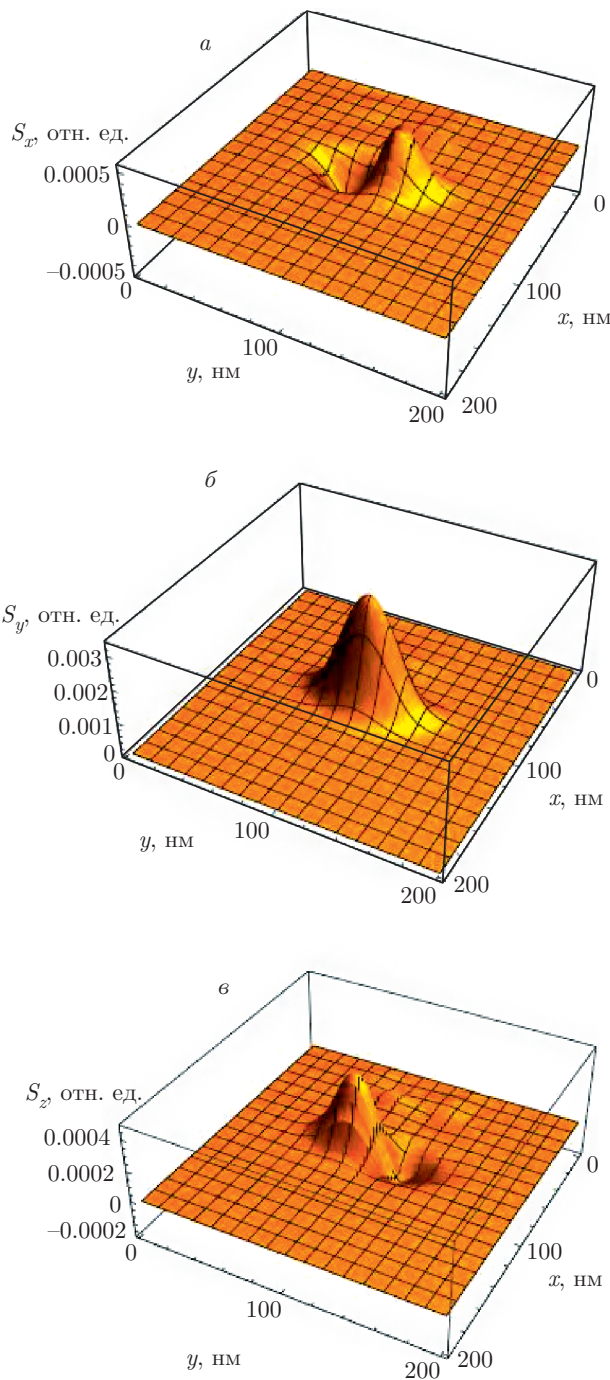


Рис. 5. То же, что на рис. 4, но для взаимодействия пакета со средней энергией 400 мэВ с немагнитным барьером шириной $L = 70$ нм и с амплитудой $U_0 = 100$ мэВ. Доминирующей по амплитуде остается та компонента спиновой плотности (S_y на рис. б), которую волновой пакет имел до взаимодействия с барьером

топологических изоляторов в устройствах передачи и обработки информации.

4. РАССЕЙНИЕ ПАКЕТОВ В СТАТИЧЕСКОЙ ЗАДАЧЕ

В данном разделе будет рассмотрен другой подход к задаче рассеяния волнового пакета на потенциальном барьере. Вначале мы получим выражение для коэффициента прохождения для состояния вида плоской волны с двухкомпонентным спинорным множителем, а затем построим из таких состояний волновой пакет и проинтегрируем коэффициент прохождения с соответствующим распределением для волнового пакета в k -пространстве. Схожая задача рассматривалась для рассеяния состояний типа плоских волн на квантовой яме в графене [6, 7], при этом потенциал ямы был немагнитный. Мы полагаем, что решение подобной задачи для волнового пакета, взаимодействующего с магнитным барьером, будучи интересным само по себе, служит также полезным дополнением к моделированию динамической задачи о рассеянии пакета, описанной выше. Возможность получения аналитического выражения для коэффициента прохождения позволит дать более обоснованную оценку значимости численных результатов из предыдущего раздела нашей работы.

Отметим, что мы не ожидаем полного количественного согласия во всей области параметров между двумя весьма разными подходами, первый из которых был рассмотрен выше и описывал эволюцию во времени волнового пакета при рассеянии на барьере. Второй подход, обсуждаемый в данном разделе, будет представлять волновой пакет через комбинацию плоских волн, и задача рассеяния вначале будет решаться для одиночной плоской волны. Следует заметить, что даже для одного класса задач (динамические либо статические задачи рассеяния) применение различных методов решения может давать результаты, существенно отличающиеся друг от друга в некоторых областях параметров. Так, в работе [46] моделировалось динамическое туннелирование волновых пакетов через различные потенциальные барьеры, и вероятность прохождения, полученная в рамках различных приближений, в некоторых случаях отличалась на десятки процентов. В работе [47] исследовалась динамика волновых пакетов в модели Haldane и наблюдались существенные различия между квазиклассическим и точным решениями. В работе [12] изучалась динамика двумерных гауссовских волновых пакетов для уравне-

ния Дирака с немагнитными барьерами и неоднородностями. Вновь можно заметить количественные различия между результатами различных методов, причем даже для нормального падения на барьер полного прохождения пакета для всех рассматриваемых параметров задачи не наблюдалось. В этой же работе отмечалась ограниченность области применимости приближения плоских волн для аналитического рассмотрения туннелирования пакета. Именно, эта область в работе [12] оценивается как хорошо работающая прежде всего для широких пакетов с $\Delta x(y) > L$, что не имеет места в нашей задаче. Также в этой работе можно заметить, что пакет туннелирует с высоким коэффициентом прохождения в случае, когда он широкий, т.е. $\Delta x(y) \geq L$, что не имеет места в нашей задаче, где рассматриваются, наоборот, очень узкие пакеты (или широкие барьеры) с $\Delta x(y) \ll L$. В этой связи можно отметить, что в работе [12] заметно уменьшение коэффициента прохождения пакета при нормальном падении по мере уменьшения отношения $\Delta x(y)/L$. Наконец, в статье [48] изучалась статическая задача о рассеянии состояний вида плоских волн на потенциале круглой формы, и вновь наблюдались значительные различия в характеристиках рассеяния, полученных в рамках разных приближений. Приведенные примеры говорят о том, что в нашем сопоставлении двух задач из существенно различных классов (динамические и статические) можно рассчитывать в основном на качественное согласие результатов. Ценность статического подхода состоит главным образом в возможности аналитического расчета характеристик рассеяния, что позволяет объяснить некоторые особенности коэффициента прохождения.

Мы решаем стационарное уравнение Шредингера $H\Psi = \varepsilon\Psi$ с гамильтонианом (3) и барьером (8) для двухкомпонентной спинорной функции $(\Psi_1(x, y), \Psi_2(x, y))$. Для барьера (8) компонента k_y квазиимпульса является хорошим квантовым числом, поэтому компоненты волновой функции можно искать в виде

$$\Psi_{1,2} = e^{ik_y y} \phi_{1,2}(x). \quad (13)$$

После подстановки функции (13) в уравнение Шредингера с гамильтонианом (3) мы получим систему обыкновенных дифференциальных уравнений для функций $\phi_{1,2}(x)$, зависящую от поляризации барьера. Мы опишем подробно решение для немагнитного барьера, когда в формуле (3) $\sigma_k = \sigma_0$. Для магнитного барьера решение строится аналогично.

В области барьера $-L/2 < x < L/2$ система уравнений для функций $\phi_{1,2}(x)$ имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} (C + U_0)\phi_1 + A(\phi_2 k_y + \phi_2') &= \varepsilon\phi_1, \\ (C + U_0)\phi_2 + A(\phi_1 k_y - \phi_1') &= \varepsilon\phi_2, \end{aligned} \quad (14)$$

где $\phi'_{1,2} = d\phi_{1,2}/dx$. В случае магнитного барьера с поляризацией $\sigma_k = \sigma_x$ система (14) примет вид

$$\begin{aligned} C\phi_1 + U_0\phi_2 + A(\phi_2 k_y + \phi_2') &= \varepsilon\phi_1, \\ C\phi_2 + U_0\phi_1 + A(\phi_1 k_y - \phi_1') &= \varepsilon\phi_2, \end{aligned} \quad (15)$$

и аналогично для других возможных поляризаций барьера.

Метод решения систем (14) или (15) одинаков. В системе (14) можно выразить ϕ_2 как

$$\phi_2(x) = \frac{A(\phi_1(x)k_y - \phi_1'(x))}{\varepsilon - C - U_0}, \quad (16)$$

что позволит получить уравнение второго порядка для ϕ_1 в виде $\phi_1'' + a^2\phi_1 = 0$, где параметр

$$a^2 = (\varepsilon - C - U_0)^2/A^2 - k_y^2. \quad (17)$$

Решением последнего уравнения будет комбинация плоских волн вида $\phi_1 = \beta_1 e^{iax} + \beta_2 e^{-iax}$ с подлежащими определению коэффициентами β_1, β_2 . Аналогичную процедуру можно проделать для падающей на барьер волны с амплитудой, равной единице при $x < -L/2$, для которой решение имеет вид $\phi_1 = 1e^{ibx} + \alpha e^{-ibx}$ с

$$b^2 = (\varepsilon - C)^2/A^2 - k_y^2, \quad (18)$$

и для прошедшей через барьер волны. Все это позволяет записать решение для компоненты ϕ_1 в следующей форме:

$$\begin{aligned} \phi_1(x) &= \\ &= \begin{cases} 1e^{ibx} + \alpha e^{-ibx}, & x < -L/2, \\ \beta_1 e^{iax} + \beta_2 e^{-iax}, & -L/2 < x < L/2, \\ \delta e^{ibx}, & x > L/2. \end{cases} \end{aligned} \quad (19)$$

Вместе с (16) выражение (19) полностью определяет волновую функцию (13). Четыре коэффициента $\alpha, \beta_1, \beta_2, \delta$ в (19) при заданной энергии ε подлежат определению из четырех граничных условий, выражающих непрерывность функции ϕ_1 и ее производной на границах барьера $x = \pm L/2$.

Знание волновой функции (13) в виде двухкомпонентного спинора $\Psi = (\Psi_1, \Psi_2)$ определяет коэффициент прохождения, который мы вначале запишем для отношения амплитуд падающей на барьер

и прошедшей волн, подобно тому как это было сделано в предыдущем разделе для выражения (9):

$$T_0(\varepsilon, k_y) = \frac{|\Psi(x > L/2)|^2}{|\Psi_{left}(x < -L/2)|^2}, \quad (20)$$

где $\Psi_{left}(x < -L/2)$ обозначает налетающую слева на барьер волну. Согласно (13), (16) и (19) координатная часть двухкомпонентного спинора как для прошедшего, так и для падающего состояния представляет собой плоскую волну, поэтому зависимость от координат в (20) и ниже в (26) пропадает. Для коэффициента (20) из равенств (19) и (16) следует, что

$$T_0(\varepsilon, k_y) = |\delta|^2, \quad (21)$$

откуда после определения коэффициентов α , β_1 , β_2 , δ из граничных условий для (19) и (16) мы получим, что в случае немагнитного барьера

$$T_0(\varepsilon, k_y) = \left| \cos(aL) - i \left(\sqrt{(a^2 + k_y^2)(b^2 + k_y^2)} - k_y^2 \right) \sin(aL)/(ab) \right|^{-2}. \quad (22)$$

Для магнитных барьеров можно получить аналогичное выражение, наиболее простая форма которого имеет вид

$$T_0(\varepsilon, k_y) = \left| \frac{4a_nb}{(a_n + b)^2 - (a_n - b)^2 e^{2ia_nL}} \right|^2, \quad (23)$$

где для барьеров с поляризацией $n = x, z$ выражение для b совпадает с (18), а параметр a_n равен

$$a_x^2 = \frac{(\varepsilon - C)^2 - (U_0 + Ak_y)^2}{A^2} \quad (24)$$

для барьера с x -поляризацией и

$$a_z^2 = \frac{(\varepsilon - C)^2 - U_0^2 - A^2 k_y^2}{A^2} \quad (25)$$

для барьера с z -поляризацией.

По аналогии с выводом выражения (12) для динамической задачи можно записать и выражение для коэффициента прохождения в статической задаче, основываясь на его определении через отношение потоков, т. е. через среднее значение оператора скорости $v_x = A\sigma_y/\hbar$ [8] в прошедшей и налетающей волне:

$$T_2(\varepsilon, k_y) = \frac{\int \Psi^+(x > L/2)v_x\Psi(x > L/2) dx dy}{\int \Psi_{left}^+(x < -L/2)v_x\Psi_{left}(x < -L/2) dx dy}. \quad (26)$$

Из равенств (19) и (16) видно, что выражения для обеих компонент волновой функции для распространяющейся направо волны, рассматриваемые справа и слева от барьера, отличаются лишь на не зависящий от координат множитель δ , определяющий коэффициент прохождения (21). Поэтому для определенного через оператор скорости выражения (26) получается результат, совпадающий с (21):

$$T_2(\varepsilon, k_y) = |\delta|^2. \quad (27)$$

Это дает нам основание применять одно выражение (21) для последующих расчетов. Следует отметить, что подобное совпадение коэффициентов (27) и (21) имеет место лишь для статической задачи с барьером ограниченных размеров, что отличается как от случая полупространства, рассмотренного в числе прочих в работе [8], так и от случая динамической задачи из предыдущего раздела нашей работы. В динамической задаче прошедшая часть волнового пакета не связана простым соотношением с налетающим на барьер пакетом, как это имеет место в равенствах (19), поэтому коэффициенты T и T_1 на рис. 2 и рис. 3 несколько отличаются друг от друга, хотя и имеют много общего в своем поведении.

В формуле (22) квантовыми числами являются k_y и ε , от которых зависят параметры a и b . Для нормально падающего на немагнитный барьер состояния вида плоской волны с $k_y = 0$ из (22) следует, что независимо от энергии значение $T_0 = 1$, т. е. имеет место клейновское туннелирование через немагнитный барьер [7, 13]. Для магнитного барьера с различной поляризацией эффект клейновского туннелирования может не иметь места, как это следует из ранее выполненных работ по рассеянию состояний вида плоских волн [15–23].

Нас интересует приложение формул (22) или (23) не для одиночной плоской волны и ее комбинаций вида (19), а для волнового пакета в форме (7). Для него можно получить разложение по плоским волнам (фурье-преобразование), которое мы обозначим как Ψ_{E,k_x,k_y} , где E обозначает среднюю энергию волнового пакета, фактически определяющуюся значениями (\bar{k}_x, \bar{k}_y) в (7). Различные значения (k_x, k_y) отвечают различным энергиям для спектра (2) и коэффициентам (22) или (23). Интегрируя по (k_x, k_y) , мы запишем коэффициент прохождения $T_s(E)$ для статической задачи как

$$T_s(E) = \int |\Psi_{E,k_x,k_y}|^2 T_0(\varepsilon, k_y) dk_x(\varepsilon) dk_y. \quad (28)$$

Отметим, что аналогичное (28) выражение было использовано в работе [12] при анализе динами-

ки гауссовских пакетов, подчиняющихся уравнению Дирака.

В формулу (28) следует подставить выражение для фурье-образа волнового пакета (7), получаемое элементарным интегрированием, и формулу (22) либо (23) соответственно для немагнитного или магнитного барьера, определяющую коэффициент прохождения плоской волны. Получаемый для $T_s(E)$ интеграл уже не вычисляется в элементарных функциях, и для получения приводимых ниже графиков используются численные методы интегрирования. Отметим, что в выражении (28) интегрирование по k_x проводится с учетом того, что k_x определяется через k_y и ε согласно выражению (2) для спектра энергии. Для нее мы учитываем обе ветви спектра (2), причем для верхней ветви берутся состояния с $k_x > 0$, а для нижней ветви — состояния с $k_x < 0$. Это обусловлено противоположным знаком групповой скорости на двух половинах дираковского конуса (2), в то время как нас интересуют лишь состояния, налетающие на барьер слева, т. е. имеющие проекцию $v_x > 0$. Известно, что энергия Ферми E_F для материалов семейства Vi_2Te_3 находится в типичных образцах в интервале 0.2...0.5 эВ, где отсчет ведется от вершины конуса (2) [1–4]. Если средняя энергия пакета E расположена в области вблизи или выше E_F , то состояния нижней ветви спектра с отрицательными энергиями практически не вносят вклад в коэффициент (28). Тем не менее, поскольку мы рассматривали пакеты со средней энергией, изменяющейся в широких пределах, в том числе и принимающей значения много меньше E_F , мы учитывали здесь обе ветви спектра (2).

Выражение (28) может быть исследовано при различных параметрах системы, в первую очередь, как функция от средней энергии пакета при различной поляризации барьера, а также при различных углах встречи θ волнового пакета с барьером. Как и для динамической задачи, мы начнем с простейшего случая нормального падения пакета на барьер с теми же параметрами: амплитудой $U_0 = 300$ мэВ и шириной $L = 200$ нм. Следует отметить, что, как и для динамической задачи, нормальное падение двумерного волнового пакета на барьер отличается от такового для плоской волны. Именно, для волнового пакета коэффициент прохождения (28) представляет собой интеграл по вкладам от состояний с различной ориентацией волнового вектора относительно нормали к барьеру, поэтому для него клейновское туннелирование с любой средней энергией может не иметь места. Действительно, в (22) для немагнитного барьера получается результат $T_0 = 1$ независимо

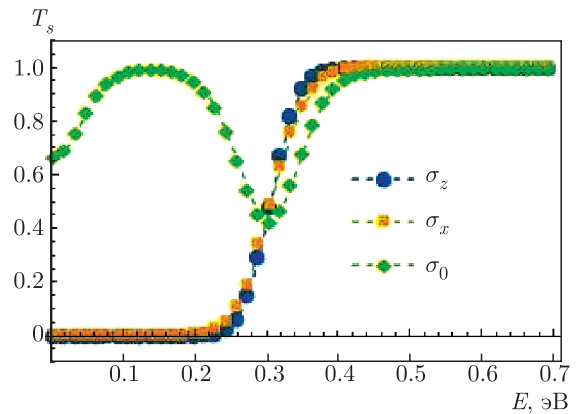


Рис. 6. Зависимости от средней энергии волнового пакета для коэффициента прохождения $T_s(E)$ в статической задаче о рассеянии пакета на барьере-ступеньке с $L = 200$ нм и $U_0 = 300$ мэВ, для нормального падения на барьер. Виден локальный максимум для случая немагнитного барьера при энергии $E \approx U_0/2$, происхождение которого объясняется резонансным прохождением плоских волн при выполнении условия (29)

от энергии лишь для строго нормального падения одной плоской волны, входящей в разложение для волнового пакета. На рис. 6 показана зависимость $T_s(E)$ в той же области средней энергии пакета и для рассеяния на барьере с теми же параметрами, что и на рис. 2: $L = 200$ нм и $U_0 = 300$ мэВ. Можно видеть, что по амплитуде в динамической задаче коэффициент прохождения примерно в полтора раза ниже.

На рис. 6 также видны особенности коэффициента для немагнитного барьера с $\sigma_k = \sigma_0$ при низких энергиях $E < 0.3$ эВ, т. е. при $E < U_0$, отсутствующие в динамической задаче. Здесь для малых энергий коэффициент прохождения существенно выше, чем для магнитных барьеров с $\sigma_k = \sigma_{x,z}$, для которых $T_s(E) \ll 1$. Это можно объяснить частичным проявлением клейновского туннелирования для электростатического барьера, хотя и не в пределе $T_s(E) = 1$, который имеет место лишь для рассеяния состояний типа плоской волны в стационарной задаче.

Для магнитных барьеров, как известно, клейновского туннелирования с $T_s(E) = 1$ может не быть при любых энергиях состояния рассеяния [15, 16, 19, 22], что подтверждается результатами на рис. 6 для $\sigma_k = \sigma_{x,z}$. В области промежуточных энергий, $0.30 < E < 0.45$ эВ, для немагнитного барьера и в области $0.25 < E < 0.45$ эВ для магнитных барьеров поведение коэффициента прохождения на рис. 2 и рис. 6 в динамической и статической зада-

чах качественно схожее в смысле возрастания при увеличении энергии и слабой зависимости $T_s(E)$ от поляризации барьера.

Обсудим подробнее особенности коэффициента прохождения на рис. 6 при $E < U_0$, наблюдаемые для немагнитного барьера. Из графика следует, что коэффициент имеет локальный максимум при средней энергии пакета, равной приблизительно половине высоты барьера. Покажем, как это можно пояснить, исходя из выражения (22). Как известно из работы [7], полное прохождение плоской волны в системе с дираковским спектром возможно не только при нормальном падении на барьер, но и при некоторых других углах и/или энергиях волны, удовлетворяющих условию резонанса, при котором выражение (22) дает значение $T_0 = 1$:

$$aL = \pi N, \quad (29)$$

где $N = 0, 1, \dots$. Подставляя в (29) выражение для $a = \sqrt{(\varepsilon - C - U_0)^2/A^2 - k_y^2}$ и учитывая, что $k_y = k \sin \theta$, где θ — угол падения волны на барьер, а амплитуда волнового вектора k определяется при заданной энергии из спектра (2), мы получим условие (29) в виде

$$\frac{L}{A} \sqrt{(E - U_0)^2 - E^2 \sin^2 \theta} = \pi N. \quad (30)$$

Вначале преобразуем уравнение (30), перейдя к безразмерным переменным $\gamma = \pi NA/LE$, $\xi = E/U_0$:

$$\sqrt{\left(1 - \frac{1}{\xi}\right)^2 - \sin^2 \theta} = \gamma. \quad (31)$$

Для волнового пакета, составленного из многих плоских волн, равенство (31) может выполняться для различных углов θ и различных энергий (т. е. различных ξ и γ) для отдельной плоской волны, входящей в пакет. Чтобы учесть интегральный характер получаемого при этом эффекта, проведем усреднение по углам θ падения плоских волн на барьер, учитывая, что среднее значение $\sin^2 \theta$ на интервале $[0, \pi/2]$ равно $1/2$. После усреднения и возведения (31) в квадрат мы получим

$$\left(1 - \frac{1}{\xi}\right)^2 - \frac{1}{2} = \gamma^2. \quad (32)$$

Из (32) непосредственно следует выражение для параметра ξ , определяющего отношение энергии плоской волны к амплитуде барьера при условии подбарьерного прохождения, когда $\xi < 1$:

$$\xi = \frac{1}{1 + \sqrt{1/2 + \gamma^2}}. \quad (33)$$

Для параметров нашей задачи с $L = 200$ нм, $A = 406.8$ мэВ·нм и типичных энергиях плоских волн в интервале $100 \dots 500$ мэВ мы видим, что значение параметра $\gamma^2 = (\pi NA/LE)^2$ в (33) много меньше единицы для всех первых резонансов с $N \approx 0, \dots, 5$, и для первоначальной оценки им можно пренебречь. В этом случае формула (33) дает нам значение $\xi \approx 0.585$. Это означает, что при средней энергии набора плоских волн, составляющих пакет, в области половины высоты барьера U_0 , коэффициент прохождения должен иметь локальный максимум, который и наблюдается на рис. 6 вблизи $E/U_0 \approx 0.6$. Отметим, что значение самого коэффициента $T_s(E)$ на рис. 6 для немагнитного барьера при отношении энергий $E/U_0 \approx 0.6$, равное примерно 0.95, находится в удовлетворительном согласии с результатом, представленном на рис. 1 работы [12], где для наиболее узкого барьера оно равно примерно 0.75.

Подчеркнем, что рассмотренное выше условие локального максимума коэффициента прохождения неразрывно связано со скалярным (немагнитным) характером потенциального барьера и рассеянием на нем состояний типа плоских волн в статической задаче. Для эволюции волнового пакета в динамической задаче, рассмотренной в предыдущем разделе, затруднительно сформулировать условие резонансного прохождения, подобное (29). Действительно, для начального состояния вида (7) задается дисперсия в координатном пространстве, приводящая к наличию дисперсии в \mathbf{k} -пространстве согласно соотношению неопределенностей. Дисперсия в \mathbf{k} -пространстве приводит к наличию дисперсии энергии пакета, которая для типичной ширины пакета $\Delta x \approx 10$ нм в нашей системе дает величину порядка $50 \dots 100$ мэВ. При таком масштабе дисперсии энергии затруднительно сформулировать резонансное условие, подобное (29). Кроме того, в динамической задаче пакет взаимодействует с барьером в течение ограниченного интервала времени, оцениваемого согласно (10) в величинах порядка 10^{-13} с, в то время как в статической задаче переменная «время» отсутствует, и каждая плоская волна из пакета задается сразу во всей области пространства по ту или иную сторону от барьера. Это позволяет в статике описать процесс взаимодействия плоской волны с барьером как бесконечный во времени и происходящий, вообще говоря, во всей области пространства, что приводит к резонансному условию (29). В этих факторах мы видим причину отсутствия резонансного увеличения коэффициента прохождения при энергиях $E < U_0$ на рис. 2 для динамической

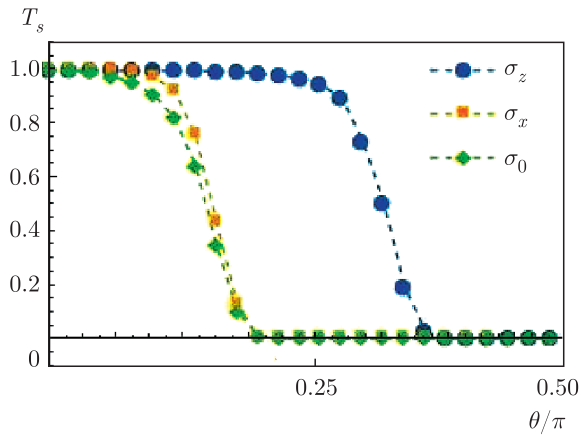


Рис. 7. Угловая зависимость $T_s(\theta)$ для волнового пакета со средней энергией 600 мэВ, налетающего на барьер с $L = 200$ нм и $U_0 = 300$ мэВ

задачи в случае немагнитного барьера, что отражает указанные качественные различия динамической и статической задач.

Что касается магнитных барьеров, то для них выполнить условие $T_0 = 1$ для волнового пакета в случае подбарьерного прохождения с энергией $E < U_0$ не представляется возможным. Действительно, запишем условие (29) для коэффициента прохождения плоской волны (23) с $a = a_n$. При его выполнении, как легко видеть, из (23) получаем $T_0 = 1$. Подставим в условие (29) выражения для параметра $a_{x,z}$ из (24) или (25), и для пакета выполним процедуру усреднения по углу θ с подстановкой $\langle \sin \theta \rangle = 0$, $\langle \sin^2 \theta \rangle = 1/2$, аналогичную проведенной выше для немагнитного барьера. После несложных вычислений мы получим, что для обоих случаев $a_n = a_x$ и $a_n = a_z$ условие (29) может удовлетворяться лишь для средней энергии пакета $E > U_0$, т. е. для надбарьерного прохождения. Это означает, что при подбарьерном прохождении с $E < U_0$ для магнитных барьеров не следует ожидать появления локального максимума в подбарьерной области для коэффициента прохождения, что мы и видим на рис. 6.

Наряду с энергетической зависимостью представляет интерес и угловая зависимость коэффициента прохождения для статической задачи, аналогичная представленной на рис. 3. На рис. 7 показана угловая зависимость $T_s(\theta)$ для волнового пакета со средней энергией 600 мэВ, налетающего на такой же барьер, для которого представлены результаты на рис. 6 для статической задачи и на

рис. 2 и рис. 3а,б для динамической задачи. Можно видеть, что для средней энергии пакета, превышающей высоту барьера, наблюдается эффективное прохождение при малых углах падения, независимо от поляризации барьера. При увеличении угла падения для всех поляризаций коэффициент прохождения убывает. Схожая зависимость с уменьшением коэффициента прохождения при увеличении угла падения пакета наблюдалась в работе [12]. Для σ_z -поляризации барьера уменьшение $T_s(\theta)$ начинается при больших углах падения. Такое поведение зависимости $T_s(\theta)$ (по крайней мере в области промежуточных углов $0.05\pi < \theta < 0.2\pi$ для поляризаций барьера σ_0 и σ_x) качественно согласуется с представленными на рис. 3 результатами для динамической задачи, при этом на рис. 3 максимальная амплитуда $T_s(\theta)$ меньше. Как и для энергетических зависимостей на рис. 2 и рис. 6, мы полагаем, что это различие связано с более интенсивным отражением в динамической задаче гармоник с большим волновым вектором, составляющих волновой пакет, из-за чего в динамической задаче максимальные величины $T(E)$ и $T(\theta)$, а также $T_1(E)$ и $T_1(\theta)$, уменьшаются. Отметим, что для σ_z -поляризации барьера коэффициент $T_s(\theta)$ сохраняет большую амплитуду при больших углах падения на барьер, чем для других случаев. Это можно объяснить эффективным поворотом локальной спиновой плотности при поляризации барьера вдоль направления z , перпендикулярного плоскости, образованной средним волновым вектором пакета (по оси x) и исходным вектором среднего спина (по оси y). При повороте спина вклад гармоник в прошедшую часть пакета, имеющих ту же поляризацию, что и сам барьер, увеличивается, что увеличивает и коэффициент прохождения. Для двух других случаев с неполяризованным барьером ($\sigma_k = \sigma_0$) и аналогично с барьером, поляризованным вдоль оси x ($\sigma_k = \sigma_x$), эффективный поворот спиновой плотности не происходит, как это видно из сравнения результатов на рис. 4 и рис. 5.

Общим наблюдением по итогам исследования динамической и статической задач является то, что даже для нормальной ориентации среднего волнового вектора двумерного волнового пакета при его взаимодействии с барьером эффект клейновского туннелирования, т. е. полное прохождение для любой энергии падающего состояния, в чистом виде не имеет места. Это, как уже было отмечено выше, обусловлено именно двумерным характером рассматриваемых волновых пакетов, в которые входят плоские волны с различной ориентацией волнового вектора относительно барьера, а не только с нормаль-

ной, как для одномерных волновых пакетов. Указанный эффект достигается как с помощью магнитных, так и немагнитных, т. е. электростатических барьеров. В немагнитном случае подобного уменьшения туннелирования при нормальном падении одномерных пакетов или плоских волн добиться нельзя как раз из-за клейновского туннелирования. Обнаруженное появление конфайнмента (понимаемого как сильное уменьшение коэффициента прохождения) для двумерных пакетов дает основы для создания механизмов воздействия на их прохождение с помощью магнитных и немагнитных барьеров, что может быть полезно при создании новых устройств на основе трехмерных топологических изоляторов с хорошими транспортными свойствами краевых состояний.

5. ВЫВОДЫ

Получены решения нестационарного уравнения Шредингера для волновых пакетов, образованных из состояний безмассового спектра на поверхности топологических изоляторов, в присутствии потенциальных барьеров. Исследуется динамика пакетов в присутствии барьеров с различной магнитной поляризацией. Рассчитаны коэффициент прохождения волнового пакета через прямоугольный барьер-ступеньку и распределения спиновой плотности. Рассмотрены зависимости от средней энергии волнового пакета, угла падения, поляризации барьера. Также получены результаты для статической задачи с коэффициентом прохождения через барьер с намагниченностью и без с помощью приближения плоских волн, с последующим обобщением результатов для волновых пакетов. Показано, что двумерный характер волновых пакетов приводит к заметным различиям в поведении коэффициента прохождения по сравнению с задачей о рассеянии плоских волн. Именно, наличие в двумерном волновом пакете плоских волн с различными проекциями волновых векторов приводит к существенному подавлению эффекта клейновского туннелирования для налетающего на барьер пакета в некоторых областях энергии. Полученные результаты свидетельствуют о возможностях воздействия через потенциальные барьеры на туннелирование и спиновую плотность состояний типа волновых пакетов в топологических изоляторах, что может быть полезно при создании спиновых фильтров, кубитов и других устройств обработки информации на основе подобных структур.

Благодарности. Авторы посвящают эту работу светлой памяти своего учителя, профессора В. Я. Демиховского, сформировавшего их интерес к задачам о динамике волновых пакетов в топологических изоляторах.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке гранта в рамках проектной части Государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ 3.3026.2017/ПЧ.

ЛИТЕРАТУРА

1. B. A. Bernevig, *Topological Insulators and Topological Superconductors*, Princeton University Press, Princeton, USA (2013).
2. *Topological Insulators. Fundamentals and Perspectives*, ed. by F. Ortman, S. Roche, and S. O. Valenzuela, Wiley-VCH Verlag, Weinheim, Germany (2015).
3. M. Z. Hasan and C. L. Kane, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 3045 (2010).
4. X.-L. Qi and S.-C. Zhang, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1057 (2011).
5. C.-X. Liu, X.-L. Qi, H. Zhang, X. Dai, Z. Fang, and S.-C. Zhang, *Phys. Rev. B* **82**, 045122 (2010).
6. J. Milton Pereira Jr., V. Milnar, F. M. Peeters et al., *Phys. Rev. B* **74**, 045424 (2006).
7. M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Nature Phys.* **2**, 620 (2006).
8. P. E. Allain and J.-N. Fuchs, *Eur. Phys. J. B* **83**, 301 (2011).
9. M.-H. Liu, C. Gorini, and K. Richter, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 066801 (2017).
10. S.-H. Zhang and W. Yang, *Phys. Rev. B* **97**, 035420 (2018).
11. J.-H. Gao, J. Yuan, W.-Q. Chen, Y. Zhou, and F.-C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 057205 (2011).
12. S. Palpacelli, N. Mendoza, H. J. Herrmann, and S. Succi, *Int. J. Mod. Phys. C* **23**, 1250080 (2012).
13. Y. Xie, Y. Tan, and A. W. Ghosh, *Phys. Rev. B* **96**, 205151 (2017).
14. Y. Li, M. B. A. Jalil, S. G. Tan, W. Zhao, R. Bari, and G. H. Zhou, *Sci. Rep.* **4**, 4624 (2014).
15. J. Gao, W.-Q. Chen, X.-Y. Feng, X. C. Xie, and F.-C. Zhang, arXiv:0909.0378 (2009).

16. Z. Wu, F. M. Peeters, and K. Chang, *Phys. Rev. B* **82**, 115211 (2010).
17. B. D. Kong, Y. G. Semenov, C. M. Krowne, and K. W. Kim, *Appl. Phys. Lett.* **98**, 243112 (2011).
18. J. P. Zhang and J. H. Yuan, *Eur. Phys. J. B* **85**, 100 (2012).
19. Z. Wu and J. Li, *Nanoscale Res. Lett.* **7**, 90 (2012).
20. C. Ertler, M. Raith, and J. Fabian, *Phys. Rev. B* **89**, 075432 (2014).
21. Z.-Q. Liu, R.-Q. Wang, M.-X. Deng, and L.-B. Hu, *Commun. Theor. Phys.* **63**, 777 (2015).
22. C. Yesilyurt, S. G. Tan, G. Liang, and M. B. A. Jalil, *Sci. Rep.* **6**, 38862 (2016).
23. B. Scharf, A. Matos-Abiague, J. E. Han, E. M. Hankiewicz, and I. Žutić, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 166806 (2016).
24. V. D. Kurilovich, P. D. Kurilovich, I. S. Burmistrov, and M. Goldstein, *Phys. Rev. B* **99**, 085407 (2019).
25. K. E. Nagaev, S. V. Remizov, and D. S. Shapiro, *Письма в ЖЭТФ* **108**, 700 (2018).
26. V. Ya. Demikhovskii, G. M. Maksimova, and E. V. Frolova, *Phys. Rev. B* **75**, 115401 (2008).
27. E. Romera and F. de los Santos, *Phys. Rev. B* **80**, 165416 (2009).
28. A. Chaves, L. Covaci, Kh. Yu. Rakhimov, G. A. Farias, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **82**, 205430 (2010).
29. V. Ya. Demikhovskii, G. M. Maksimova, A. A. Perov, and E. V. Frolova, *Phys. Rev. A* **82**, 052115 (2010).
30. V. Ya. Demikhovskii, G. M. Maksimova, A. A. Perov, and A. V. Telezhnikov, *Phys. Rev. A* **85**, 022105 (2012).
31. В. Я. Демиховский, А. В. Тележников, Е. В. Фролова, Н. А. Кравец, *ФНТ* **39**, 26 (2013).
32. В. Я. Демиховский, А. В. Тележников, *Письма в ЖЭТФ* **99**, 110 (2014).
33. В. Я. Демиховский, Р. В. Туркевич, *Письма в ЖЭТФ* **101**, 501 (2015).
34. S. Choi, C.-H. Park, and S. G. Louie, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 026802 (2014).
35. F. Dolcini, R. C. Iotti, A. Montorsi et al., *Phys. Rev. B* **94**, 165412 (2016).
36. F. Dolcini, *Phys. Rev. B* **95**, 085434 (2017).
37. M. V. Durnev and S. A. Tarasenko, *Ann. Phys.* 1800418 (2019).
38. V. A. Sablikov and A. A. Sukhanov, *Phys. Rev. B* **98**, 115423 (2018).
39. D. V. Khomitsky, A. A. Chubyanov, and A. A. Konakov, *ЖЭТФ* **150**, 1200 (2016).
40. L. Fu, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 266801 (2009).
41. Р. В. Туркевич, Д. В. Хомицкий, *ЖЭТФ* **153**, 283 (2018).
42. С. Кунин, *Вычислительная физика*, Мир, Москва (1992).
43. А. М. Сатанин, *Динамика электронов в наноструктурах*, Изд-во ННГУ, Нижний Новгород (2006).
44. M. Büttiker and R. Landauer, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 1739 (1982).
45. Yue Ban, E. Ya. Sherman, J. G. Muga, and M. Büttiker, *Phys. Rev. A* **82**, 062121 (2010).
46. J. Ankerhold and M. Saltzer, *Phys. Lett. A* **305**, 251 (2002).
47. S. Roy, A. G. Grushin, R. Moessner, and M. Haque, *Phys. Rev. A* **92**, 063626 (2015).
48. J.-S. Wu and M. M. Fogler, *Phys. Rev. B* **90**, 235402 (2014).