

ДИНАМИКА ЭЛЕКТРОННЫХ ВОЛНОВЫХ ПАКЕТОВ В ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ДИЭЛЕКТРИКАХ, НАХОДЯЩИХСЯ ВО ВНЕШНЕМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Н. А. Кравец, Е. В. Фролова

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», г. Саров Нижегородской обл.

Введение

Топологические изоляторы – особый тип материала, который внутри объема представляет собой диэлектрик, а на поверхности проводит электрический ток. Объемные состояния топологических диэлектриков характеризуются энергетическим спектром, который имеет запрещенную зону. Поверхностные же состояния являются бесщелевыми и локализованными вблизи границ двумерного или трехмерного газа. В такой ситуации электроны, лежащие на поверхности изолятора, находятся в проводящем состоянии, а электроны в объеме не проводят электрический ток.

В последние годы возрос интерес к изучению свойств двумерных и трехмерных топологических изоляторов [1–3]. Так, для экспериментального исследования поверхностных состояний рассматриваемых структур применялась техника спектроскопии с угловым разрешением ARPES, а так же методы СТМ, СТС и ряд оптических методов. Подобное активное исследование этих материалов связано с их необычной зонной структурой [2–8]. Последнее приводит к тому, что поляризованные по спину электроны практически не рассеиваются на дефектах и неровностях поверхности диэлектрика. Это свойство представляет большой интерес в практическом плане для создания устройств спинтронники с малой диссипацией. В этой связи, несомненно, важным представляется исследование динамики электронных волновых пакетов в данных структурах.

Ранее в работе [9] авторами была исследована эволюция гауссовских волновых пакетов, сформированных из поверхностных электронных состояний в топологическом диэлектрике Bi_2Se_3 , находящемся в магнитном поле, перпендикулярном плоскости 2D электронного газа. Было показано, что в этом случае проявляется нестандартная динамика электронной и спиновой плотностей, зависящая от специфики краевых состояний топологических диэлектриков и начальных характеристик волнового пакета. При этом начальный волновой пакет расщепляется на части, вращающиеся в противоположные стороны с одинаковыми частотами.

Пространственно-временная эволюция электронных волновых пакетов, содержащих состояния одной энергетической зоны

В настоящей работе был проведен более глубокий анализ эволюции электронных волновых пакетов

в топологическом диэлектрике Bi_2Se_3 , находящемся в перпендикулярном магнитном поле, с учетом эффектов, обусловленных неэквиливантностью спектра гамильтониана [3]:

$$H_{eff} = v_F \left[(\hbar k_x - eBy) \sigma_y + i \hbar \partial_y \sigma_x \right] + \Delta \sigma_z, \quad (1)$$

В данном случае для векторного потенциала \vec{A} была выбрана калибровка Ландау $\vec{A} = (\vec{B}y, 0, 0)$.

С помощью не сложных аналитических вычислений, можно получить выражения для собственных функций (2) и собственных значений (3) гамильтониана (1):

$$|n, s\rangle = \begin{pmatrix} \sin \theta_{n,s} |n-1\rangle \\ \cos \theta_{n,s} |n\rangle \end{pmatrix}, \quad (2)$$

$$E_{n,s} = s v_F \sqrt{2e\hbar B (n + m_0^2)}. \quad (3)$$

Коэффициент $s = \pm 1$ отражает наличие двух, противоположных по знаку, ветвей энергетического спектра (3), а именно зоны проводимости и валентной зоны. $|n\rangle$ – состояние гармонического осциллятора, $\theta_{n,s} = \sqrt{n} / \left(s \sqrt{n + m_0^2} - m_0 \right)$, $m_0 = \Delta l_B / \sqrt{2} \hbar v_F$, Δ – энергия Зеемана, $l_B = \sqrt{\hbar/eB}$ – магнитная длина (будем работать в системе, в которой скорость света равна единице $c = 1$).

Неэквиливантность энергетического спектра (3) при изучении пространственно-временной эволюции начального локализованного состояния предполагает существование явлений коллапса и возрождения [10–12]. В работе [10] было показано, что если энергетический спектр системы не является эквидистантным и приближенно описывается выражением $E_n = E_{n_0} + E'_{n_0} (n - n_0) + E''_{n_0} (n - n_0)^2 / 2 + \dots$, то линейный член разложения определяет период классических осцилляций волнового пакета $T_{cl} = 2\pi\hbar / E'_{n_0}$. При этом наряду с классическим периодом T_{cl} возникает дополнительный, чисто «квантовый» временной масштаб $T_R = 4\pi\hbar / E''_{n_0}$ – время возрождения ($T_R \gg T_{cl}$), который играет существенную роль в долговременной эволюции волновых пакетов.

Для иллюстрации этого фундаментального утверждения рассмотрим динамику локализованного волнового пакета, содержащего состояния одной (верхней) энергетической зоны ($s=1$) с номерами уровней Ландау вблизи среднего значения n_0 и дисперсией σ [13]:

$$\Psi(x, y, t) = \int dp \sum_{n,s} c_{n,s}(p) \varphi_{p,n,s}(x, y) \cdot \exp(-iE_{n,s}t/\hbar)$$

$$c_n^{s=-1}(p) = 0 \quad (4)$$

$$c_n^{s=1}(p) = \sqrt{\frac{l_B}{\pi\sigma}} \exp\left(-\frac{(p-q)^2 l_B^2}{2\hbar^2} - \frac{(n-n_0)^2}{2\sigma^2}\right)$$

Здесь $c_n^s(p)$ – коэффициенты разложения начального волнового пакета по стационарным состояниям (2).

После интегрирования (4) по квазиимпульсу получаем явный вид для компонент волновой функции (5):

$$\Psi_1(x, y, t) = f(x, y) \sum_{n=1} \frac{\sqrt{2n}}{2^n n!} \left(\frac{y - ql_B^2 - ix}{l_B}\right)^{n-1} \times \left(1 + \frac{m_0}{\sqrt{n+m_0^2}}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{(n-n_0)^2}{2\sigma^2} - i\Omega\sqrt{n+m_0^2}t\right),$$

$$\Psi_2(x, y, t) = f(x, y) \sum_{n=1} \frac{1}{2^n n!} \left(\frac{y - ql_B^2 - ix}{l_B}\right)^{n-1} \times \left(1 - \frac{m_0}{\sqrt{n+m_0^2}}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{(n-n_0)^2}{2\sigma^2} - i\Omega\sqrt{n+m_0^2}t\right),$$

где функция

$$f(x, y) = \frac{1}{2\pi^{3/4} l_B \sqrt{\sigma}} \times \exp\left(-\frac{x^2 + (y - ql_B^2)^2 - 2ix(y + ql_B^2)}{4l_B^2}\right).$$

Для визуализации полученных результатов, удобно координаты x и y измерять в единицах магнитной длины l_B , время в единицах Ω^{-1} ; кроме того, введем безразмерный параметр $a = l_B q$.

На рис.1 представлено распределение полной электронной плотности (6) в топологическом диэлектрике Bi_2Se_3 помещенном в магнитное поле $B = 10\text{T}$ ($m_0 = 0,2$; $\Omega = 12,3 \cdot 10^{13} \text{c}^{-1}$) в разные моменты времени. $\Omega = v_F \sqrt{2}/l_B$ – циклотронная частота. Исходный локализованный волновой пакет, собран из состояний вблизи уровня $n_0=15$ с дисперсией $\sigma = 3$.

$$\rho(x, y, t) = |\Psi_1(x, y, t)|^2 + |\Psi_2(x, y, t)|^2 \quad (6)$$

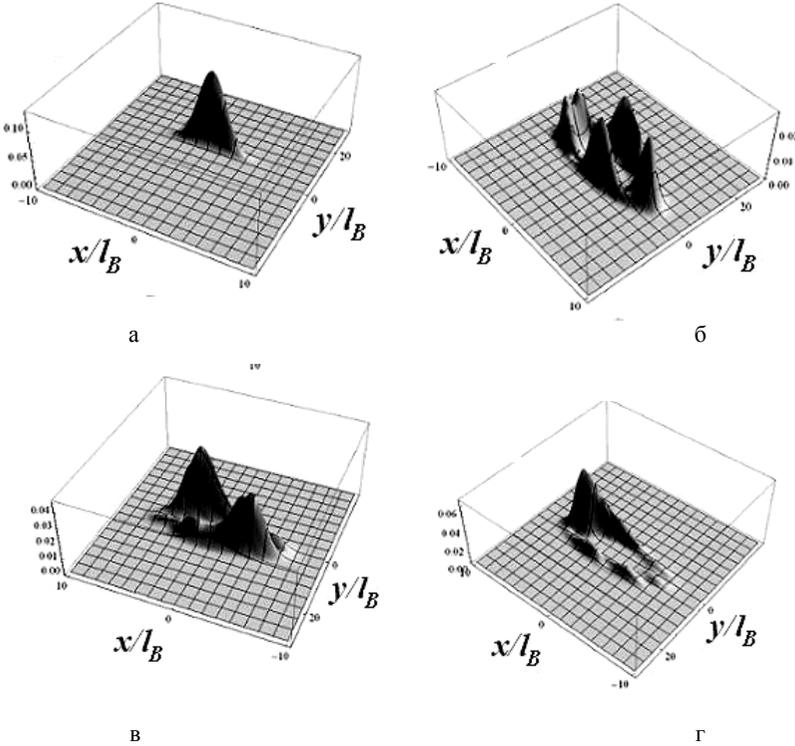


Рис. 1. Распределение полной электронной плотности (6) начального волнового пакета (4), обладающего дисперсией $\sigma = 3$ в разные моменты времени: а – $t = 0$; б – $t = T_R/10$ – возродилось 5 подпакетов; в – $t = T_R/4$ – возродилось 2 подпакета; г – $t = T_R/2$ – полное возрождение волнового пакета.

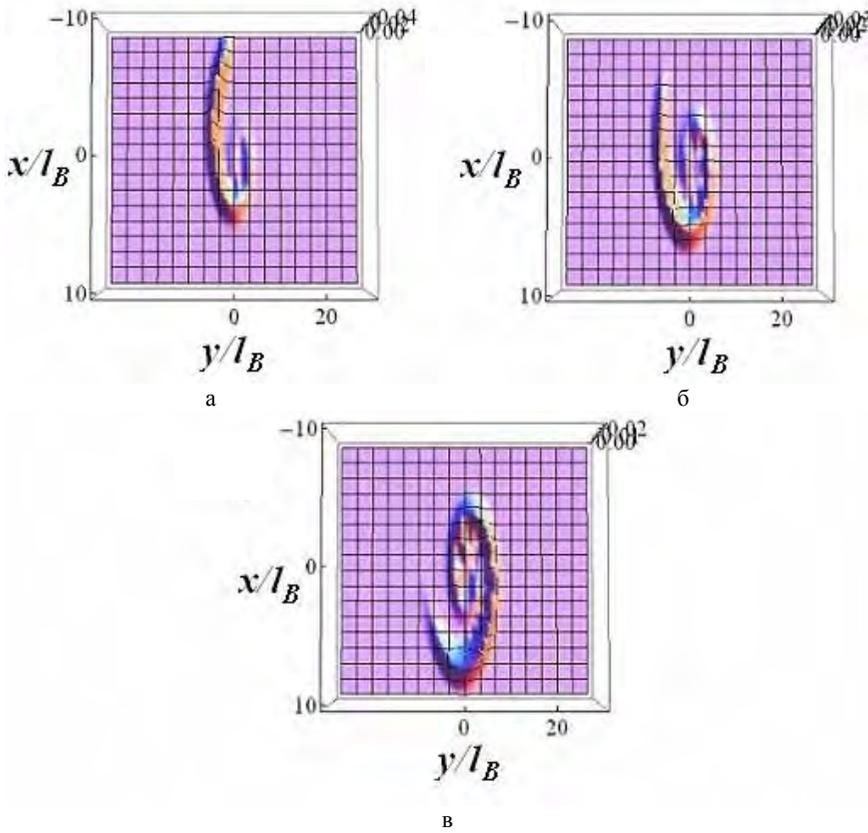


Рис. 2. Распределение полной электронной плотности (6) начального волнового пакета (4), обладающего дисперсией $\sigma = 15$ в разные моменты времени: а – $t = 0,2$ пс; б – $t = 0,3$ пс; в – $t = 0,4$ пс.

При малых временах волновой пакет движется по классической циклотронной орбите с периодом $T_{cl} = 2\pi\hbar/E'_{n_0} = \left(4\pi\sqrt{n_0 + m_0^2}\right)/\Omega = 40 \cdot 10^{-14} c$. С течением времени электронная плотность распределяется практически однородно по циклотронной орбите. Это происходит из-за расфазировки вкладов отдельных стационарных состояний, обусловленной неэквидистантностью уровней Ландау с номерами $n_0 - \sigma < n < n_0 + \sigma$. Однако на временном интервале $T_{cl} < t \leq T_R$ в отдельные моменты $t = mT_R/n$ (где m и n – взаимно простые числа) фазы отдельных слагаемых в (5) становятся кратны 2π , что позволяет начальному волновому пакету частично собраться в $N = n(3 - (-1)^n)/4$ подпакетов. $T_R = 4\pi\hbar/E''_{n_0} = \left(16\pi(n_0 + m_0^2)^{3/2}\right)/\Omega = 24 \cdot 10^{-12} c$ – время полного возрождения, при котором пакет снова становится локализованным в пространстве. Следует отметить, что при $t \geq T_R$ классическая эволюция пакета возрождается вновь.

При увеличении дисперсии σ , наблюдение эффектов возрождения затруднено. Для демонстрации этого факта на рис. 2 представлено распределение

полной электронной плотности для волнового пакета собранного из уровней Ландау вблизи среднего значения $n_0 = 20$ с дисперсией $\sigma = 15$ в разные моменты времени. Видно, что электронная плотность закручивается в спираль. Данное явление может быть объяснено несоразмерностью циклотронных частот соответствующих далеким друг от друга уровням Ландау. Кроме того, в данном случае наблюдается неоднородное заполнение электронной плотностью пространства внутри самой циклотронной орбиты.

Пространственно-временная эволюция электронных волновых пакетов, содержащих состояния с положительной и отрицательной энергиями

Рассмотрим эволюцию волнового пакета в топологическом изоляторе Bi_2Se_3 , содержащем состояния как верхней, так и нижней энергетических зон. Аналогично ситуации, рассмотренной в предыдущем разделе, выберем коэффициенты разложения в (4) в виде:

$$c_n^{s=-1}(p) = c_n^{s=1}(p) = \sqrt{\frac{l_B}{\pi\sigma}} \exp\left(-\frac{(p-q)^2 l_B^2}{2\hbar^2} - \frac{(n-n_0)^2}{2\sigma^2}\right)$$

В этом случае явный вид компонент волновой функции пакета в произвольный момент времени принимает вид:

$$\Psi_1(x, y, t) = -i \cdot f(x, y) \sum_{n=1} \frac{\sqrt{2n}}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{y - ql_B^2 - ix}{l_B} \right)^{n-1} \times$$

$$\times \left(1 + \frac{m_0}{\sqrt{n+m_0^2}} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{(n-n_0)^2}{2\sigma^2} \right) \cdot \sin(\Omega \sqrt{n+m_0^2} t),$$

$$\Psi_2(x, y, t) = f(x, y) \sum_{n=1} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{y - ql_B^2 - ix}{l_B} \right)^{n-1} \times$$

$$\times \left(1 - \frac{m_0}{\sqrt{n+m_0^2}} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{(n-n_0)^2}{2\sigma^2} \right) \cdot \cos(\Omega \sqrt{n+m_0^2} t),$$

где функция

$$f(x, y) = \frac{2}{2\pi^{3/4} l_B \sqrt{\sigma}} \times$$

$$\times \exp \left(-\frac{x^2 + (y - ql_B^2)^2 - 2ix(y + ql_B^2)}{4l_B^2} \right)$$

Распределение полной электронной плотности (б) начального волнового пакета (4), содержащего состояния с положительными и отрицательными энергиями, обладающего дисперсией $\sigma = 3$ в разные моменты времени представлено на рис. 3.

В результате начальный волновой пакет (рис. 3а), состоящий наполовину из состояний верхней зоны и наполовину – из состояний нижней энер-

гетической зоны, на начальной стадии своей эволюции расщепляется на два подпакета, вращающиеся в противоположных направлениях по циклотронной орбите (рис. 3б, 3в, 3г). При этом два раза за циклотронный период наблюдается интерференция подпакетов. Через достаточно большой промежуток времени, когда каждый подпакет распределяется практически равномерно по циклотронной орбите (рис. 3д), эффект интерференции наблюдается практически permanently за исключением моментов дробного возрождения (рис. 3е). На рис. 3е представлена плотность вероятности в момент времени $t \approx T_R/4$, представляющая собой регулярную структуру из четырех фракций (каждый из двух подпакетов частично собирается в два пакета-фракции).

Заключение

В данной работе исследованы эффекты коллапса и возрождения волновых пакетов в топологическом диэлектрике Bi_2Se_3 в присутствии внешнего перпендикулярного магнитного поля. Аналитически и численно изучена долгосрочная эволюция электронных волновых пакетов, являющихся суперпозицией состояний с квантовыми числами n , близкими к номеру некоторого уровня Ландау n_0 .

Показано, что вместо стандартной циклотронной динамики – вращения с постоянной частотой ω_c – должна наблюдаться эволюция, характеризующаяся полной делокализацией волнового пакета в пределах

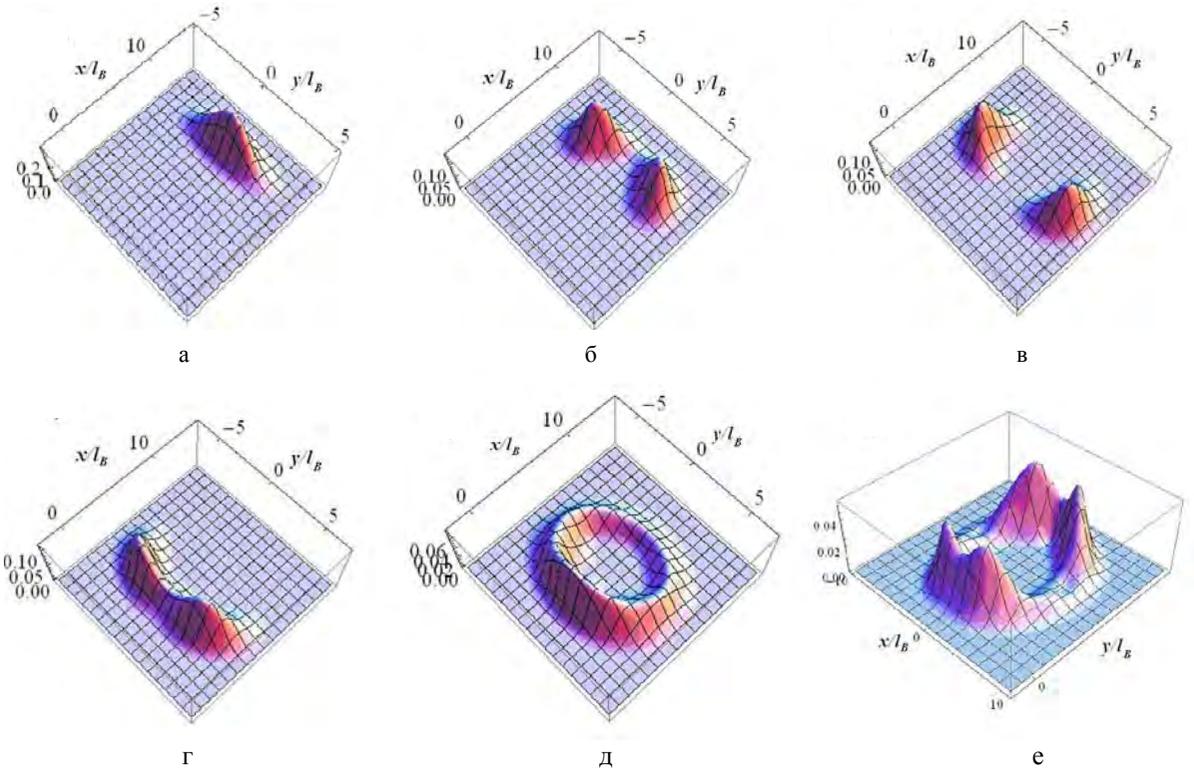


Рис. 3. Распределение полной электронной плотности (б) начального волнового пакета (4) содержащего состояния с положительными и отрицательными энергиями, обладающего дисперсией $\sigma = 3$ в разные моменты времени: а – $t = 0$; б – $t = 0,04$ пс, в – $t = 0,08$ пс, г – $t = 0,1$ пс, д – $t = 0,5$ пс, е – $t = T_R/4 = 6$ пс

циклотронной траектории и последующим его восстановлением. При этом можно выделить несколько характерных времен периодичности, которые зависят от деталей спектра собственных значений исследуемой системы. Если энергетический спектр системы не является эквидистантным и приближенно описывается выражением $E_n = E_{n0} + E'_{n0}(n - n_0) + E''_{n0}(n - n_0)^2/2 + \dots$, то линейный член разложения определяет период классических осцилляций волнового пакета $T_{cl} = 2\pi\hbar/E'_{n0}$, время последующего восстановления – $T_R = 4\pi\hbar/E''_{n0}$, время частичного восстановления – T_{Rm}/n , где m и n – взаимно простые числа.

Литература

1. Konig M., Buhmann H., Molenkamp L. W. et al., Phys. Soc. Jpn. 2008. V. 77, P. 031007.
2. Hasan M. Z., Kane C. L. Reviews of Modern Physics. 2010. V. 82, P. 3045.
3. Moore J. E. Nature Phys. 2009. V. 5, P. 378.

4. Shen S Q. Topological Insulators. Dirac Equation in Condensed Matters. Springer Series in Solid-State Sciences, 2012.

5. Qi H. L., Zhang S. H. Rev. Mod. Phys. 2011. V. 83, P. 1057.

6. Konig M., Wiedmann S., Brne C. et al. Science. 2007. V. 318, P.766.

7. Демиховский В. Я., Тележников А. В. Письма в ЖЭТФ. Т. 99. Вып. 2, С. 110–114.

8. Maksimova G. M., Demikhovskii V. Ya., Frolova E. V. Physical Review B.2008.V. 78, P. 235321.

9. Фролова Е. В., Кравец Н. А. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2016. № 3, С. 1–5.

10. Averbukh I. Sh., Perel'man N. F. Sov. Phys. Usp. 1991. V. 34, P. 572.

11. Yeazell J. A. et al. Observation of the Collapse and Revival of a Ridberg Elctronic Wave Packet, Physical Review L. 1990.V. 64, P. 2007.

12. Vrakking M. J. J. Observation of fractional revivals of a molecular wave packet, Physical Review A. 1990. V. 54, R37

13. Romera E., de los Santos F. Phys. Rev.B. 2009. V. 80, P. 165416.