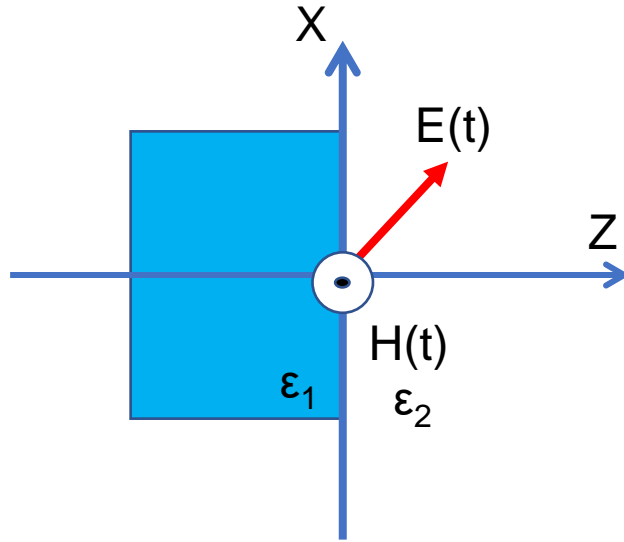


Семинар №10. Поверхностные возбуждения

1. Поверхностные электромагнитные возбуждения (ПЭВ):
фононные поляритоны, поверхностные плазмоны
2. Возбуждение поверхностных поляритонов
 - Линейно оптические методы
 - Нелинейно-оптические методы (КАРС)
3. Топологические изоляторы.
 - Фотоэлектронная спектроскопия с угловым разрешением (ARPES)

V. Поверхностные возбуждения в твердом теле

1. Поверхностные возбуждения: фононные поляритоны, плазмонные поляритоны



В области частот запрещенной зоны, где диэлектрическая проницаемость отрицательна, объемные поляритоны существовать не могут (если пренебрегать затуханием). Однако вследствие нарушения трансляционной инвариантности, на поверхности кристалла возможно появление других квазичастиц – **поверхностных поляритонов**.

Рассмотрим простейший случай полубесконечного кристалла с одним дипольно-активным колебанием. Пусть кристалл заполняет полупространство $z < 0$. Плоскость $z = 0$ есть плоскость раздела между кристаллом и другой средой (например, изотропной) с диэлектрической проницаемостью ϵ_2 . Из уравнений Максвелла для монохроматической волны в немагнитной среде легко получить следующее уравнение:

$$\Delta \mathbf{E} + \frac{\epsilon \omega^2}{c^2} \mathbf{E} - \text{grad div} \mathbf{E} = 0$$

Запишем уравнение для x-компоненты электрического поля:

$$\frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} + \frac{\epsilon \omega^2}{c^2} E_x - \frac{\partial^2 E_z}{\partial x \partial z} = 0$$

Запишем решение для поля \mathbf{E} в виде:

$$\mathbf{E}^{(2)} = \mathbf{E}_0^{(2)} \exp(iq_x x - \xi_2 z), \quad z > 0$$

$$\mathbf{E}^{(1)} = \mathbf{E}_0^{(1)} \exp(iq_x x + \xi_1 z), \quad z < 0$$

$$\xi_i = \sqrt{q_x^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_i}$$

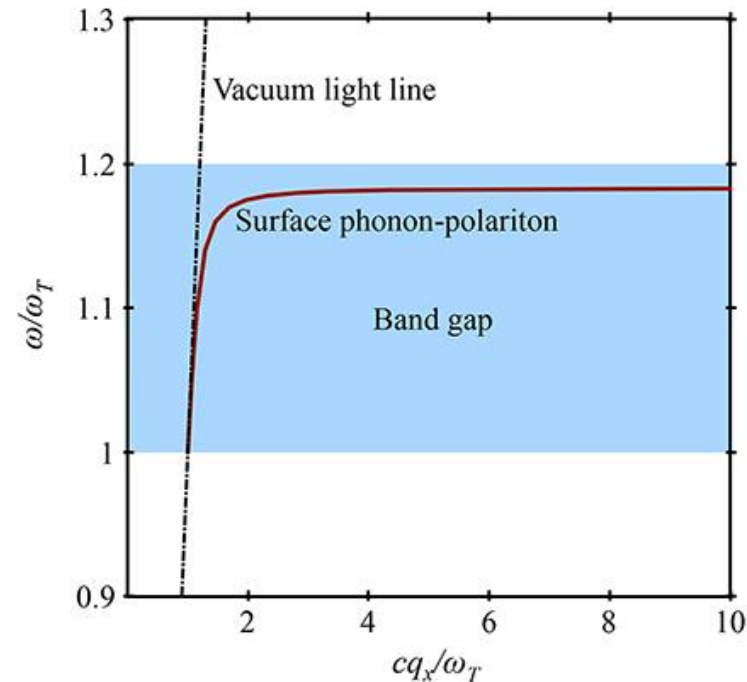
$$D_{n1} = D_{n2}$$

$$E_{\tau 1} = E_{\tau 2}$$

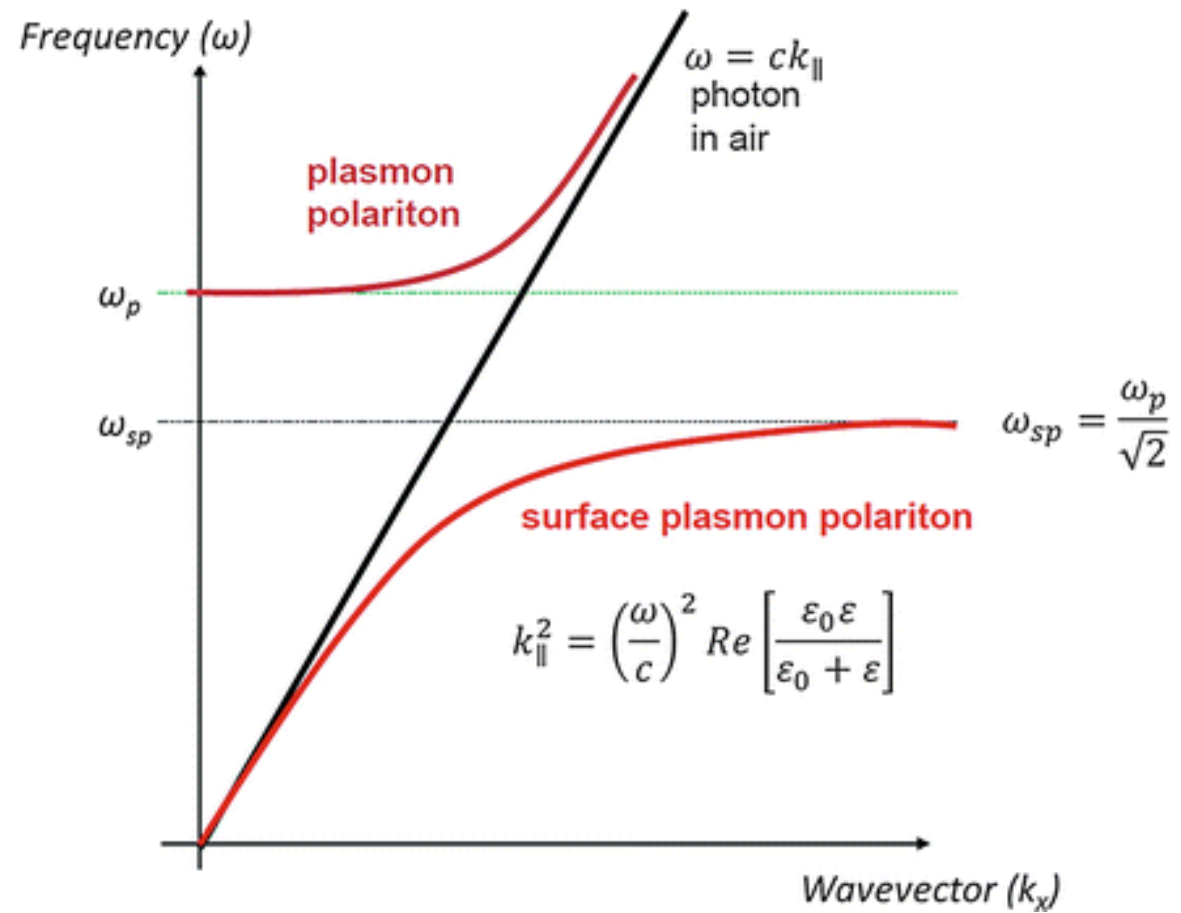
Подставляя выражения для \mathbf{E} в волновое уравнение и используя граничные условия для нормальных составляющих электрической индукции и тангенциальных компонент электрического поля, можно получить дисперсионные соотношения для поверхностных поляритонов:

$$q_x = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\varepsilon_2 \varepsilon_1(\omega)}{\varepsilon_2 + \varepsilon_1(\omega)}}$$

$$-\varepsilon_2 < \varepsilon_1(\omega)$$



Дисперсия поверхностных плазмон-поляритонов



Возбуждение поверхностных поляритонов

1. Линейно-оптические методы

Дифракция на решетке

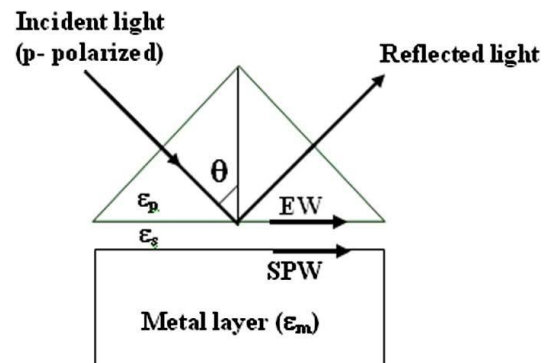
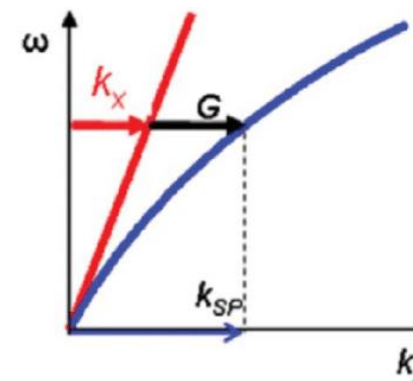
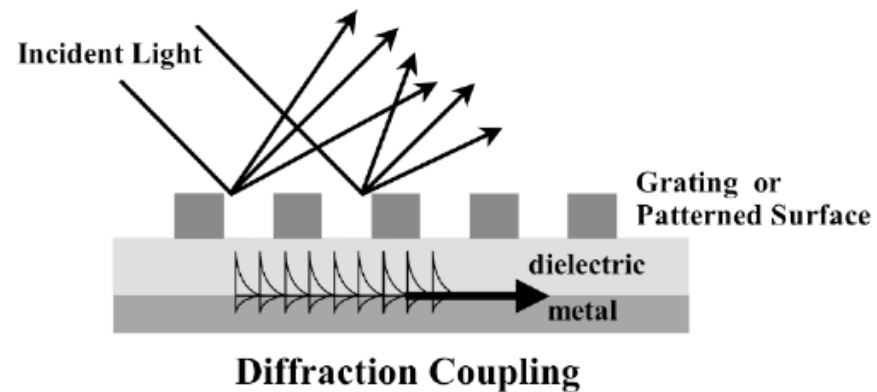
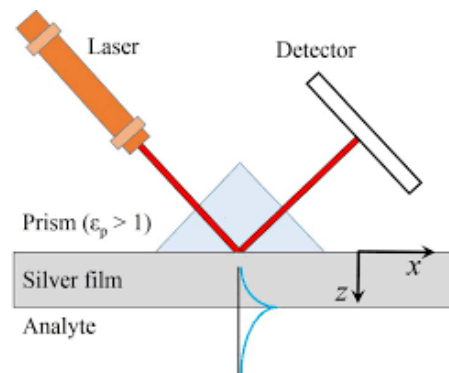
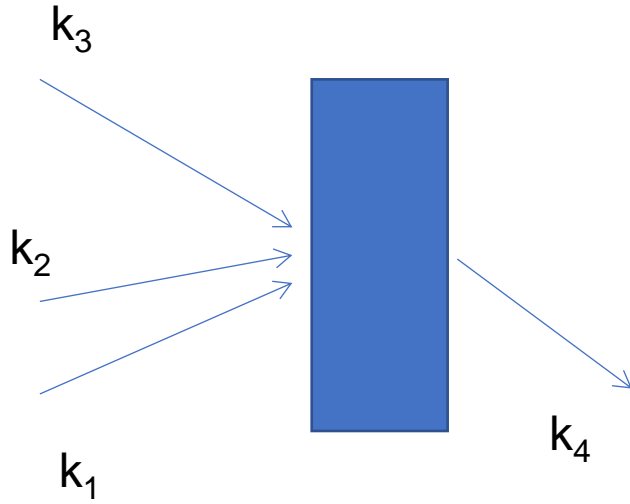


Схема Отто

Схема Кречмана



2. Нелинейно-оптические методы (КАРС)



1й каскад:

$$\omega_1 - \omega_2 = \omega_{surf}$$

$$k_{1x} - k_{2x} = q_{x surf}$$

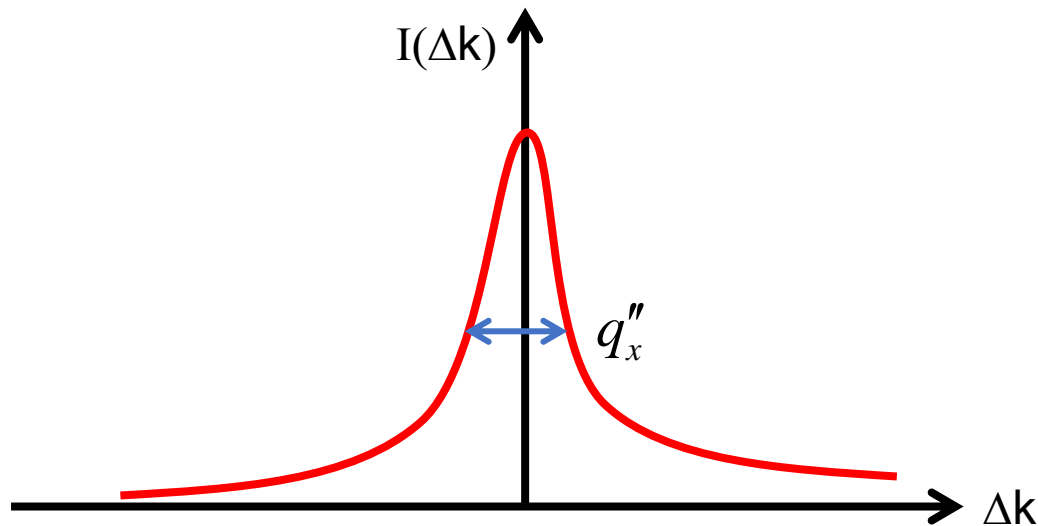
2й каскад:

$$\omega_1 + \omega_{surf} = \omega_4$$

$$\vec{k}_3 + \vec{i}q_x = \vec{k}_4$$

$$P^{(1)}(\mathbf{r}, \omega_1 - \omega_2) = \chi_1^{(2)}(\mathbf{r}) E_{10}(\mathbf{r}) E_{20}^*(\mathbf{r}) e^{-i(\omega_1 - \omega_2)t + i(k_{1x} - k_{2x})x} + \text{K.C.}$$

$$P^{(2)}(\mathbf{r}, \omega_1 + \omega_{surf}) = \chi_2^{(2)}(\mathbf{r}) E_{10}(\mathbf{r}) E_{20}^*(\mathbf{r}) e^{-i(\omega_1 + \omega_{surf})t + i(\mathbf{k}_3 + \mathbf{q}_x)x} + \text{K.C.}$$



$$I(\omega_4, \Delta k_x) \propto \frac{1}{\Delta k_x^2 + q_x''^2}$$

$$\Delta k_x \equiv k_{1x} - k_{2x} - q'_x$$

$$q_x = q'_x + iq_x''$$

3. Топологические изоляторы

“Первооткрыватели ТИ”: Shoucheng Zhang , Duncan Haldane, Charles Kane (медаль Дирака - 2012)



НО! Еще в 1985 году Панкратов&Волков предсказали топологические изоляторы (Volkov B A, Pankratov O A JETP Lett. 42 178 (1985)!

“Как производится гламур Nature и Science, очень хорошо видно по начавшемуся несколько лет назад шуму вокруг топологического изолятора, объявленного с их подачи новым, невиданным состоянием вещества. И уже неважно, что последующие эксперименты показывают, что явление «топологического изолятора», конечно, интересно, но никаких великих инноваций, ни научных, ни технологических, не сулит, потому что исходный материал безнадежно далек от необходимого качества... Поэтому если фотоэмиссионный отклик системы демонстрирует действительно красивые картинки (гламур), то транспортный (самый важный для возможных практических применений) демонстрирует, увы, только то, что в «топологическом изоляторе» много неконтролируемых примесей и дефектов”.

Критики концепции ТИ:

- С.Н. Молотков, Письма в ЖЭТФ, 2013
- Д.Х. Квон, Независимая газета, 22.01.2014

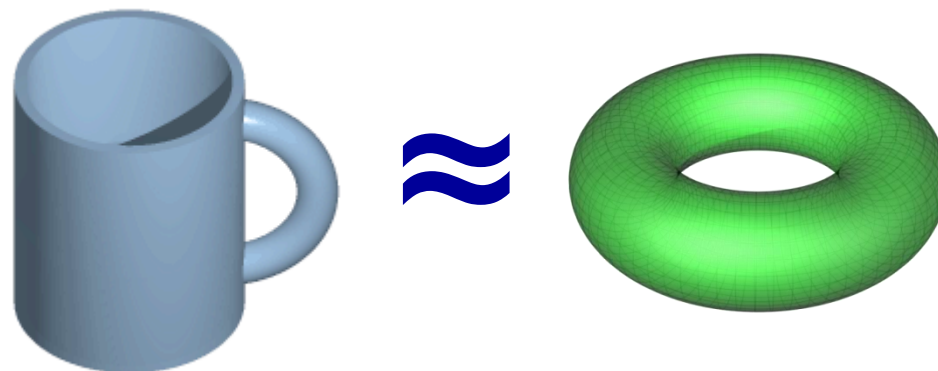
Топология: раздел математики, изучающий явления непрерывности. Не изучает метрические свойства объектов (например, расстояние).

Типы деформаций без разрывов и склеиваний

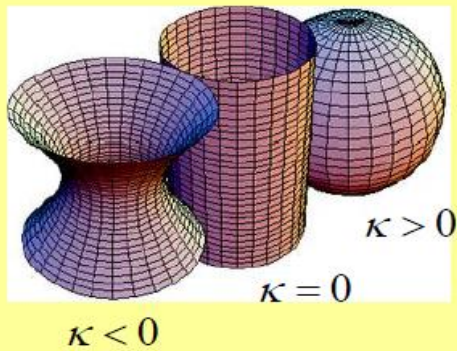
Гомеоморфизм: взаимно однозначное и взаимно непрерывное отображение топологических пространств
 $X \approx Y$

Гомотопия: семейство непрерывных отображений, непрерывно зависящих от параметра t
 $X \sim Y$

Бублик и кружка гомеоморфны и гомотопичны!



ГЕОМЕТРИЧЕСКАЯ АНАЛОГИЯ



Гауссова кривизна

$$\kappa = 1/(r_1 r_2)$$

Формула Гаусса — Бонне

$$\frac{1}{4\pi} \iint_S \kappa dS = 1 - g$$



$g=0$



$g=1$



$g=3$

g – род поверхности (количество ручек)

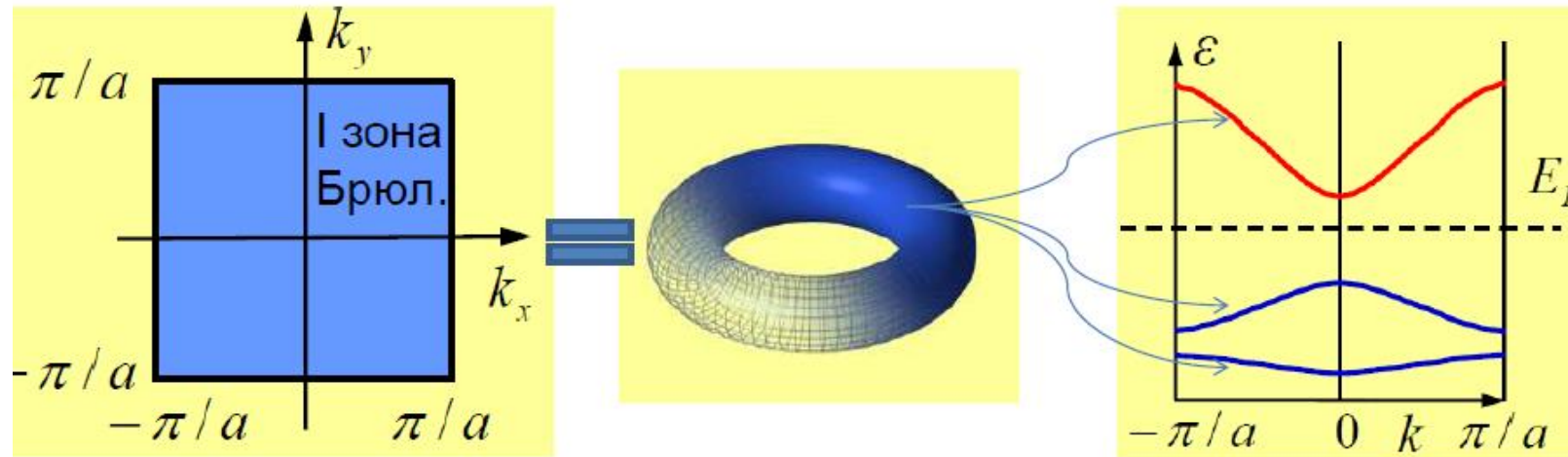
Но! Лист Мёбиуса и бутылка Клейна характеризуются $g=1$!

Гипотеза Пуанкаре: всякое односвязное компактное трехмерное (n -мерное) многообразие без края гомеоморфно трехмерной (n -мерной) сфере.
(Доказал Г. Перельман)

Топологический изолятор – материал с нетривиальной топологией, в объеме являющийся диэлектриком, а на поверхности – проводником.

Но! Проводящая поверхность не является отличительной чертой ТИ. Принципиально то, что поверхностные состояния “топологически защищены”.

Зона Бриллюэна – тор, (сшиваем края зоны Бриллюэна)
блеховские волновые функции $\psi_{n,\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{n,\mathbf{k}}$
отображают этот тор в пространство $E(\mathbf{k})$.

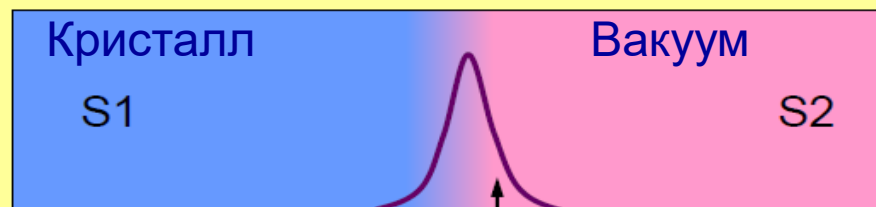


Объемный диэлектрик!

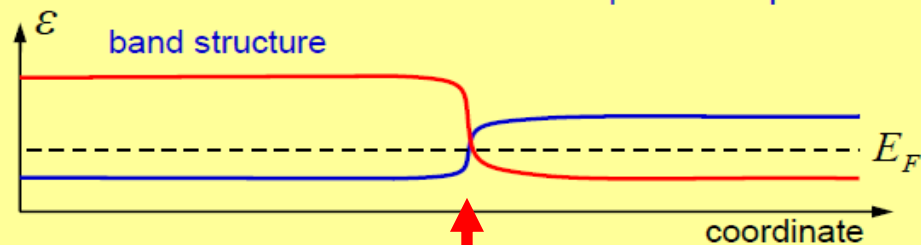
ТОПОЛОГИЧЕСКИ НЕЭКВИВАЛЕНТНЫЕ СИСТЕМЫ



$g=1$



бесщелевое краевое состояние

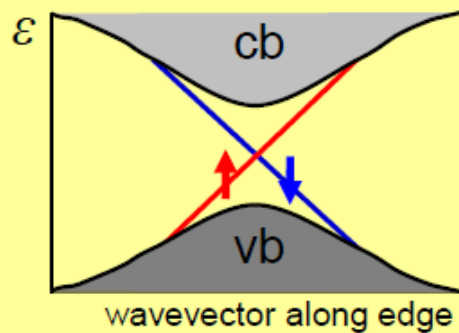


Зоны смыкаются!!!



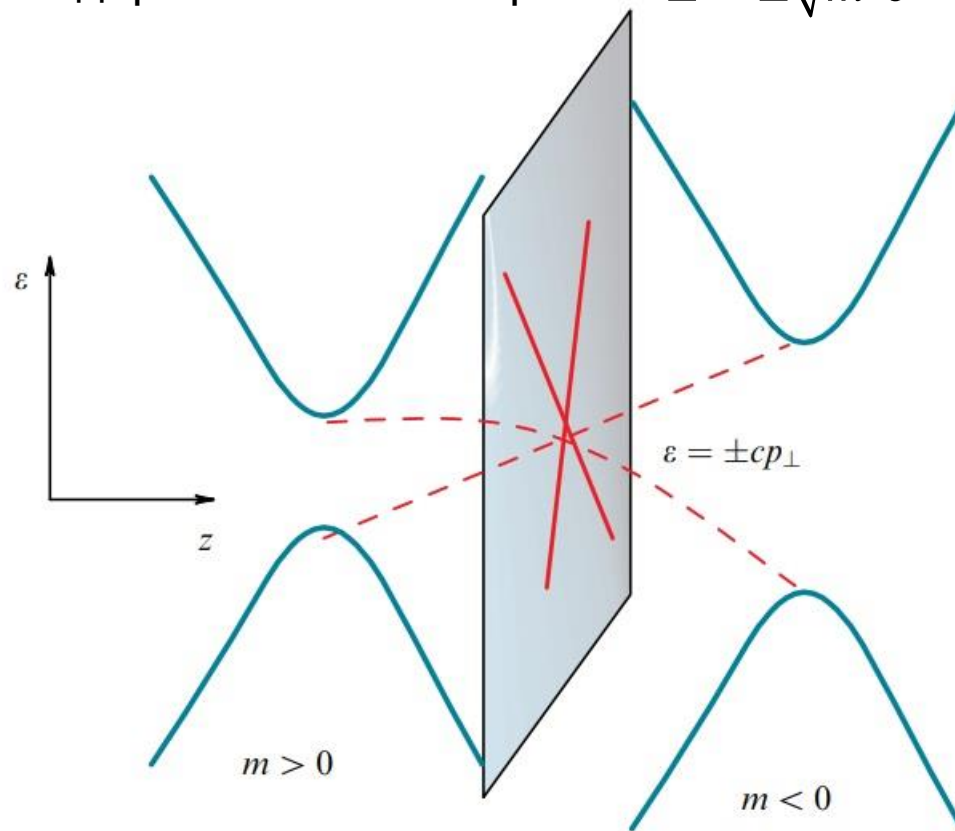
$g=0$

Электронный спектр



...вакуум тоже изолятор
с $E_{\text{gap}}=2mc^2$

Энергия дираковского электрона $E = \pm\sqrt{m^2c^4 + c^2p^2}$

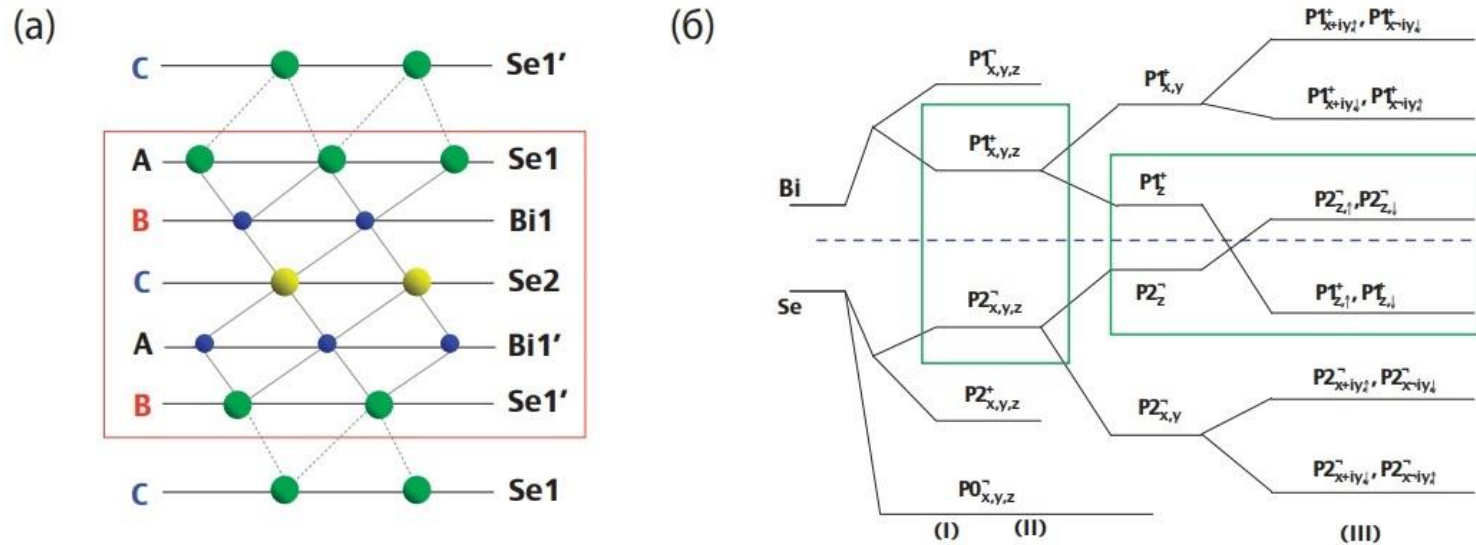


Инверсный контакт между двумя дираковскими пространствами с отрицательной и положительной массами покоя. Независимо от конкретной формы перехода на поверхности контакта существуют невырожденные по спину вейлевские электронные состояния с линейной дисперсией.

Литература: Панкратов О.А. “Поверхностные состояния топологических изоляторов”, УФН, 188, 1226 (2018)

Что приводит к инверсии энергетических зон?
 Сильное спин-орбитальное взаимодействие в полупроводниках
 с тяжелыми атомами (Te, Se, ...)

$$\hat{H}_{spin-orbit} = \frac{\hbar e^2}{4m^2 c^2 r^3} \hat{\sigma} \cdot \hat{L} \text{ (нерелят. случай)}$$



Кристаллическая структура соединения Bi_2Se_3 , вид сбоку. (б) Схема изменения энергии орбиталей p-типа Bi и Se при включении (I) химической связи, (II) кристаллического поля и (III) спин-орбитального взаимодействия.

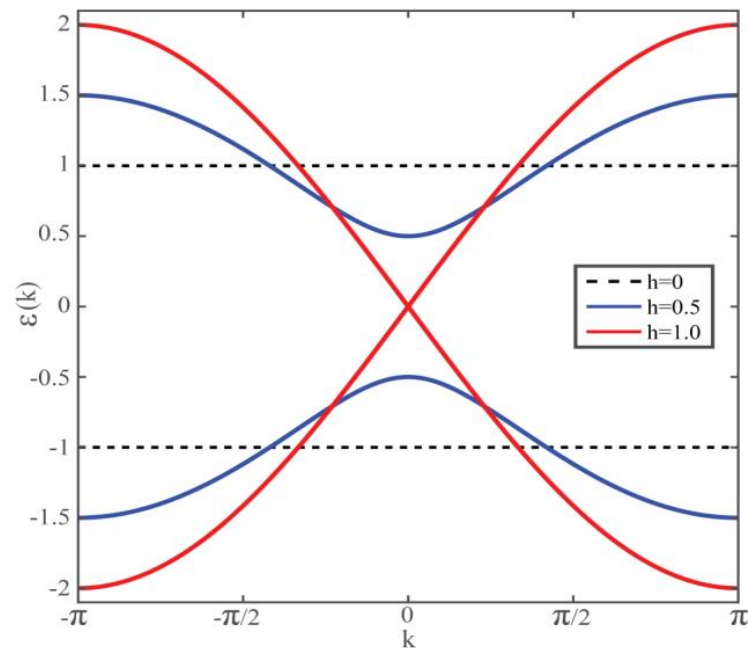
Модель №1:

одномерная модель Изинга в поперечном магнитном поле h



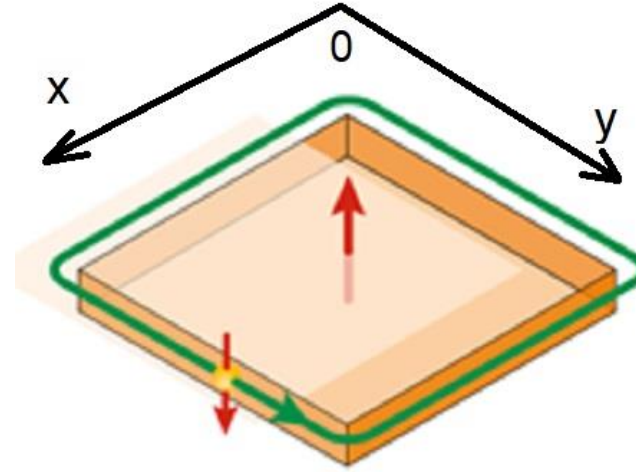
$$H = \sum_j (-s_j^x s_{j+1}^x - h s_j^z) \quad h = \pm 1 \Rightarrow \Delta E_{gap} = 0!$$

$$\varepsilon_k(h) = \pm 2J \sqrt{(h - \cos k)^2 + (\sin k)^2}$$



Электронные спектры при различных магнитного поля h

Модель №2



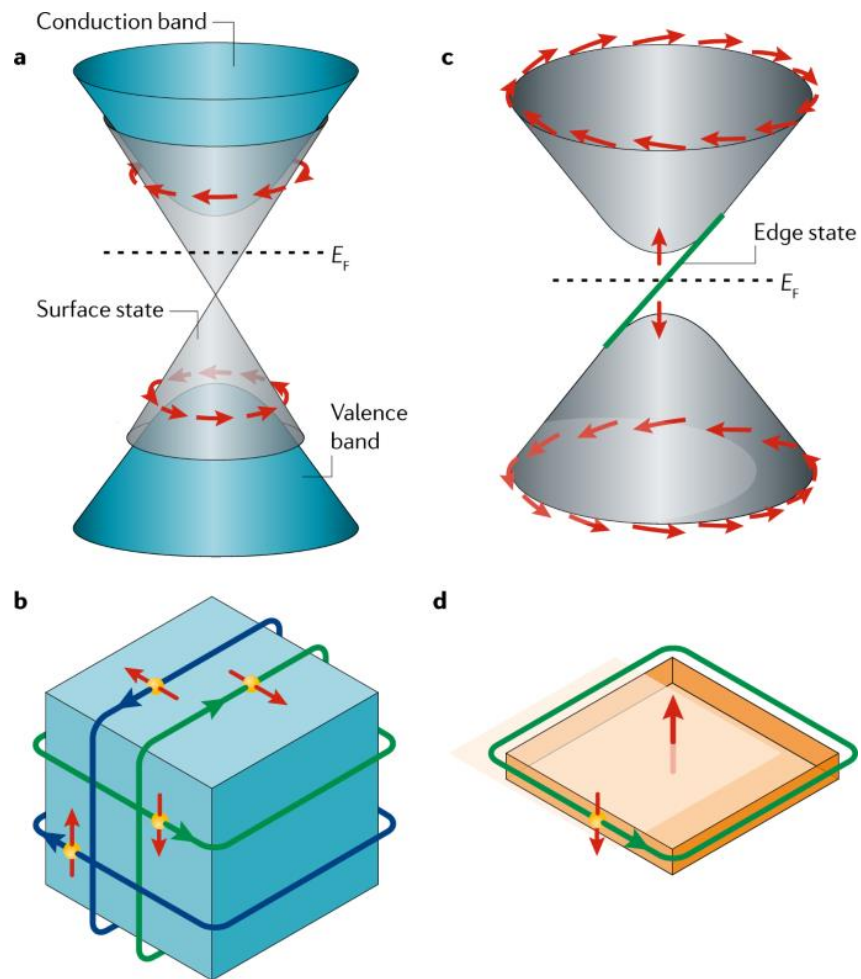
Гамильтониан электронов в тонкой пленке топологического изолятора

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + v_{Fermi} (p_x \sigma_y - p_y \sigma_x)$$

Диагонализуя гамильтониан, можно получить энергетический электронный спектр

$$E(p_x, p_y) = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + v_{Fermi} \sqrt{p_x^2 + p_y^2}$$

Поверхностные состояния электрона являются «топологически защищенными»!
Импульс поверхностного электрона и ориентация его спина связаны и изменяются только согласованно друг с другом (**spin-momentum locking**). Ток электронов на поверхности топологического изолятора одновременно происходит в двух взаимно противоположных направлениях. Поверхностные электроны не могут быть рассеяны **НАЗАД** дефектами или другими возмущениями той среды, в которой движутся.



Топологические инварианты:

1. Z_2 инвариант Кейна и Мели – наличие нулей

пфаффиана $P(\mathbf{k}) = \text{Pf} [\langle u_i(\mathbf{k}) | \Theta | u_j(\mathbf{k}) \rangle]$, $|u_i(-\mathbf{k})\rangle = \Theta |u_i(\mathbf{k})\rangle$

– C.L. Kane. E.J. Mele. PRL. 2005

Пфаффиан:
$$\text{Pf} \begin{bmatrix} 0 & M \\ -M^T & 0 \end{bmatrix} = (-1)^{n(n-1)/2} \det(M)$$

2. Фаза Берри (геометрическая фаза)

3. Число Черна (кривизна Берри)

Эксперимент:

- тяжелые ядра (типа Те), сильное спин-орбитальное взаимодействие
- эффект нулевой массы, как в графене-
- высокая подвижность носителей
- примеси и дефекты не разрушают проводимость (движение электронов “топологически защищено”)

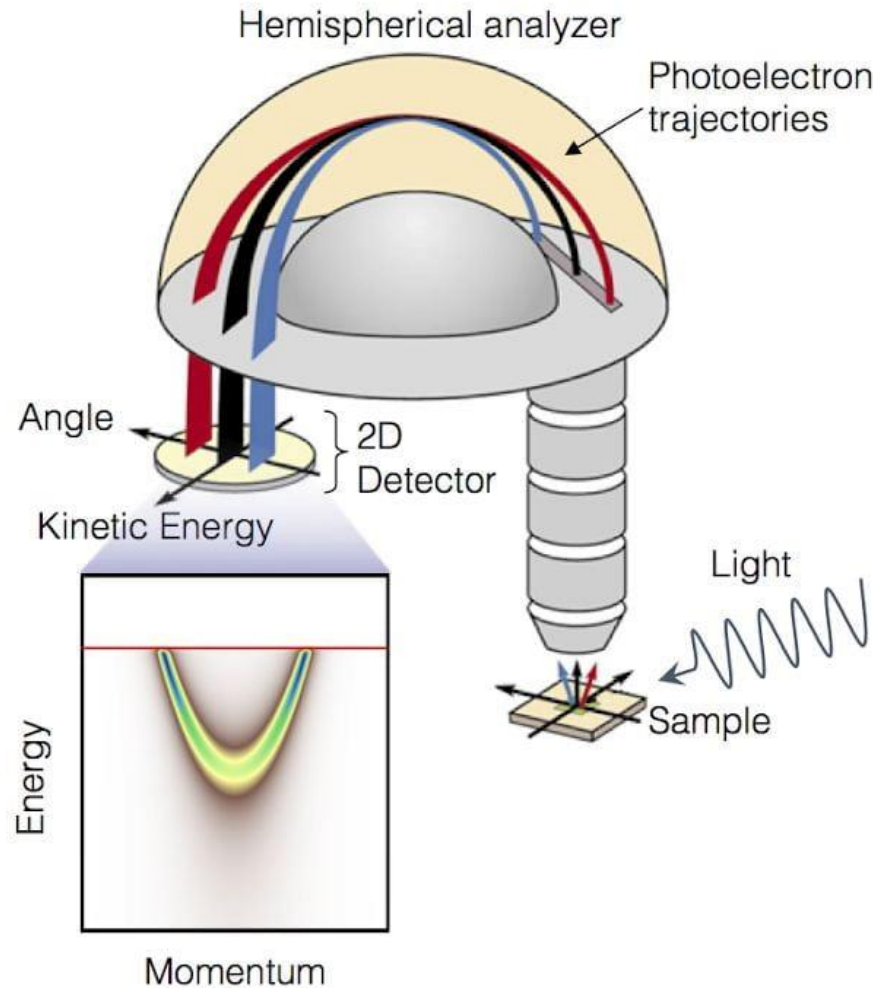
1. HgTe, тяжело выращивать

2. Bi_2Te_3 , Bi_2Se_3 , Sb_2Te_3 ...

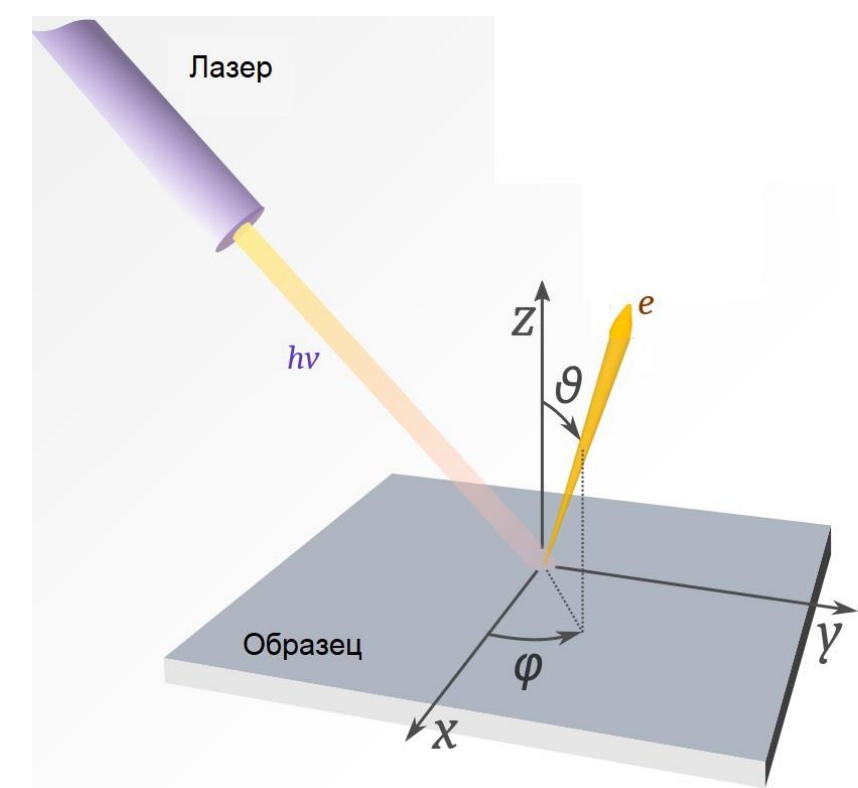
Методы роста:

MBE, MOCVD

Фотоэлектронная спектроскопия с угловым разрешением (ARPES)



В полушариях анализатора энергии поддерживается постоянное напряжение, по центральной траектории следуют электроны с кинетической энергией, равной заданной энергии прохождения. Те, у кого более высокая или низкая энергия, оказываются ближе к внешнему или внутреннему полушарию на другом конце анализатора



$$E_{\text{кин}} = \hbar\omega - E_b - \Phi$$

E_b – энергия связи e^-

Φ – работа выхода e^- из материала

Из трансляционной симметрии вдоль поверхности следует, что продольный импульс e^- сохраняется (в пренебрежении импульсом фотона):

$$\hbar k_x^{\text{initial}} = \sqrt{2mE_{\text{кин}}} \sin \theta \cos \varphi$$

$$\hbar k_y^{\text{initial}} = \sqrt{2mE_{\text{кин}}} \sin \theta \sin \varphi$$

$$\hbar k_z^{\text{initial}} = \sqrt{2mE_{\text{кин}}} \cos \theta$$

$$k_{\parallel} = \sqrt{\frac{2mE_{\text{кин}}}{\hbar^2}} \sin \theta = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (\hbar\omega - E_b - \Phi)} \sin \theta$$

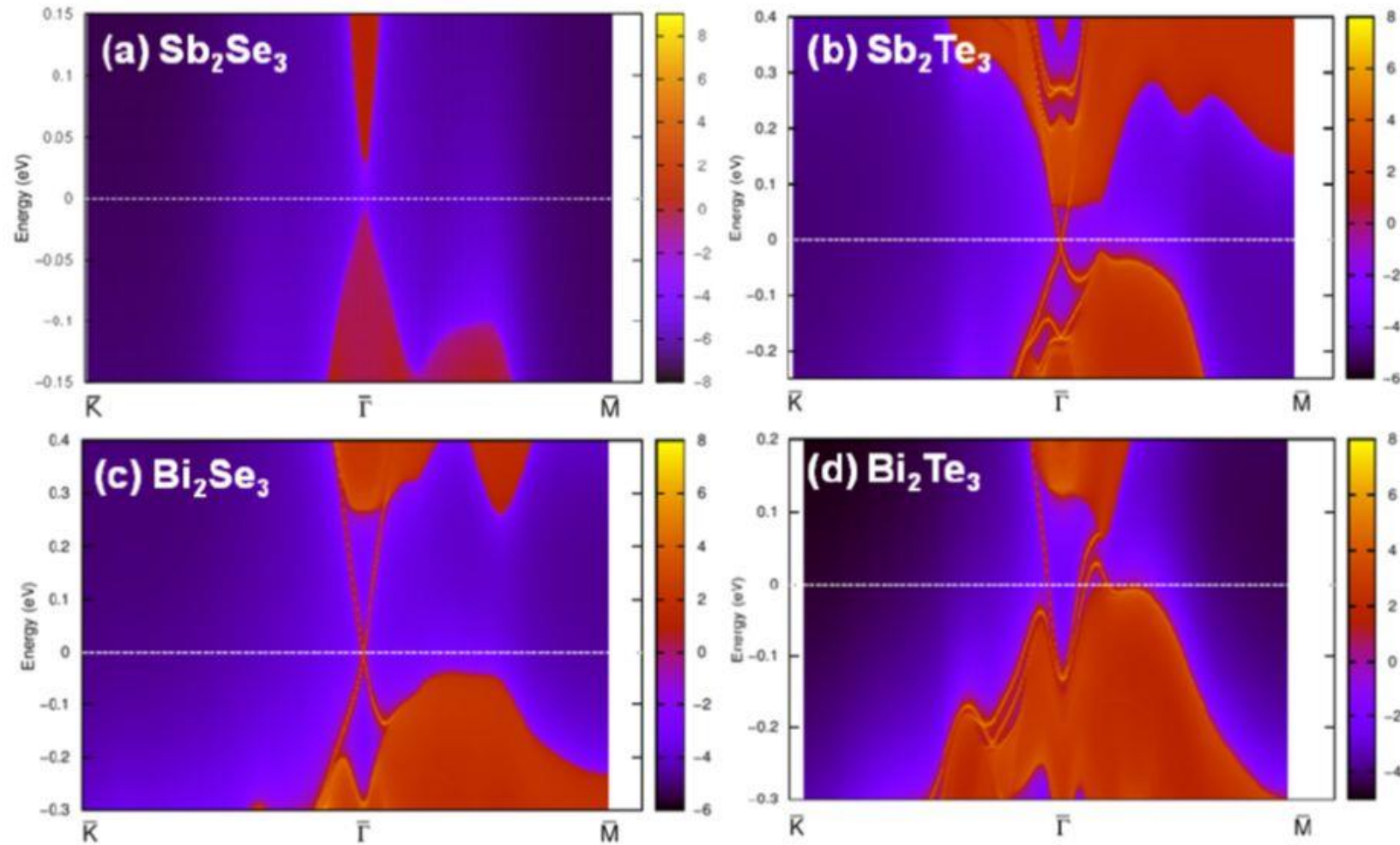
$$k_{\perp} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E_{\text{кин}} + V_0)} \cos \theta, \quad V_0 - \text{поверхн. потенциал}$$

$$k = \sqrt{k_{\perp}^2 + k_{\parallel}^2}$$

Примеры спектров ARPES

Topological insulators in Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 and Sb_2Te_3 with a single Dirac cone on the surface

Haijun Zhang¹, Chao-Xing Liu², Xiao-Liang Qi³, Xi Dai¹, Zhong Fang¹ and Shou-Cheng Zhang^{3*}



Спасибо за внимание!