

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Томский государственный университет
Сибирское отделение Российской академии наук

ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

**Сборник материалов
XIV Российской научной студенческой конференции**

*13–15 мая 2014 г.
Томск, Россия*

ОРГАНИЗАТОРЫ:

- Томский государственный университет
- Сибирский физико-технический институт им. В.Д. Кузнецова при ТГУ
- НОЦ «Физика и химия высокоэнергетических систем»
- Томского государственного университета
- Институт физики прочности и материаловедения СО РАН
- Институт сильноточной электроники СО РАН
- Институт физики полупроводников СО РАН

Томск
Издательский Дом Томского государственного университета
2014

Исследование свойств поверхностных состояний и состояний краёв запрещённой щели в топологическом изоляторе Bi_2Te_3

И.А. Швец, И.П. Русинов, Е.В. Чулков
Томский государственный университет, 634050, Томск
shvets_ia@mail.ru

Investigation of surface states and bulk gap edge states properties in topological insulator Bi_2Te_3

I.A. Shvets, I.P. Rusinov, E.V. Chulkov
Tomsk State University, 634050, Tomsk
shvets_ia@mail.ru

Топологические изоляторы (ТИ) в настоящее время являются широко изучаемым классом материалов. Интерес к ним вызван возможностью их применения спинтронике, а также вследствие их уникальных физических свойств [1]. В объёме данных материалов состояния, образующие края запрещённой щели, являются инвертированными из-за влияния спин-орбитального взаимодействия. За счёт этого на поверхности данных материалов индуцируются спин-поляризованные поверхностные состояния металлического типа, также именуемые дираковскими.

Большинство теоретических исследований ТИ основаны на теории функционала электронной плотности (ТФЭП). Важным её недостатком является недооценка величины энергетической щели в полупроводниковых материалах вследствие приблизительного учёта многочастичных эффектов. В случае ТИ это приводит также к неверному описанию дисперсии состояний краёв запрещённой щели, что вызвано связью дисперсии указанных состояний и ширины щели вследствие упомянутого инвертирования её краёв. Это, в свою очередь, сказывается на дисперсии дираковских состояний и на свойствах их поляризации.

Недавние экспериментальные исследования зависимости свойств поверхностных состояний от волнового вектора [2] позволяют сделать вывод, что имеющиеся теоретические исследования, основанные как на ТФЭП, так и на $\mathbf{k}\mathbf{p}$ -методе, переоценивают s_z компоненту спина приблизительно в два раза. Предполагается, что такое расхождение связано со значительным влиянием многочастичных эффектов на формирование данной величины, которые недостаточно учитываются в рамках данных методов.

В представляемой работе в рамках ТФЭП при использовании имеющихся приближений для обменно-корреляционного функционала исследу-

довалась связь ряда наиболее важных для изучения свойств, характеризующих ТИ: ширины запрещённой щели в объёме данного соединения, дисперсии состояний её краёв, дисперсии спин-поляризованных дираковских состояний, зависимость спиновой поляризации от величины волнового вектора. Данное исследование было проведено на примере Bi_2Te_3 одного из наиболее изученных соединений, принадлежащих к данному классу соединений. Для описания обменно-корреляционной энергии использовалось обобщенное градиентное приближение (GGA) на примере широко применяемого PBE [3] функционала и приближение локальной плотности (LDA) на примере PW91 [4] функционала.

Расчеты показали, что в плоскости отражения зоны Бриллюэна в случае GGA и LDA приближений ширина прямой запрещенной щели принимает значения 129 мэВ и 107 мэВ, соответственно, что существенно ниже экспериментально полученных значений (220 ± 20 мэВ). В точке Γ щель достигает значений 321 мэВ и 344 мэВ. Важно отметить, что точка Дирака расположена ниже максимума валентной зоны на 109 мэВ и 139 мэВ, который локализован в обоих случаях в окрестности точки (0.34;0.42), записанной в базисных векторах обратной решетки. Область инверсии и характер дисперсии дираковского состояния при этом изменяются незначительно. Расчет компонента спина s_z для дираковского состояния показал, что при удалении от точки Γ в направлении $\Gamma-K$ ее величина составляет порядка 60% от значений, получаемых в рамках кр теории, что хорошо согласуется с экспериментом.

Литература

1. *Xiao-Liang Qi, Shou-Cheng Zhang* Topological insulators and superconductors // Rev. Mod. Phys. 2011. Vol. 83. P. 1057–1110.
2. *Nomura M., Souma S., Takayama A., Sato T., Takahashi T., Eto K., Kouji Segawa, Yoichi Ando* Relationship between Fermi-Surface Warping and Out-of-Plane Spin Polarization in Topological Insulators: a View from Spin spin- and angle-resolved photoemission // Phys. Rev. B. 2014. Vol. 89. P. 045134-1 – 045134-2.
3. *Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M.* Generalized Gradient Approximation Made Simple // Phys Rev. Lett. 1996. Vol. 77. P. 3865–3868.
4. *Perdew J.P., Wang Y.* Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy // Phys. Rev. B. 1992. Vol. 45. P. 13244–13245.