УДК 538.9

# TRANSPORT OF THE DIRAC QUASIELECTRONS THROUGH THE STEP-LIKE POTENTIAL BARRIER IN THE 3D TOPOLOGICAL INSULATOR

**A. Korol, N. Medvid, I. Hutsalo, V. Isai**
*National University of Food Technologies*

**Key words:**
*Graphene*
*Nanostructures*
*Fermi velocity*
*Dirac-Weyl equation*
*Transmission coefficient*

**Article history:**
Received 15.01.2019
Received in revised form 30.01.2019
Accepted 13.02.2019

**Corresponding author:**
A. Korol
**E-mail:**
npnuht@ukr.net

**ABSTRACT**

The object of our investigation is the modern nanostructure which consists of the topological insulators — the material that is widely studied in recent years.

The coefficient of transmission of quasielectrons as a function of their energy is calculated for the given structure. The equation of Dirac type with the relevant Hamiltonian is solved for this purpose. The transmission coefficient is found with the help of matching of the own functions at the interface of two insulators. When evaluating and analyzing the results of this work we take into account the effect of the external electrostatic and magnetic potentials resulting in that one of the topological insulators serves as a step-like barrier. The Landau gauge is used when we take into account the magnetic field. The electrostatic and the magnetic field are both homogeneous, that is the barrier is the rectangular one.

It is shown that the considered junction is not the resonant — tunneling structure. The transmission spectra, i. e. the dependence of T on an angle of incidence of quasielectrons on the junction $\varphi$ and on energy E depend on the quantity $\alpha = v_2 / v_1$ essentially, where $v_1, v_2$ — Fermi velocities in the first and the second isolators respectively. For values $\alpha > 1$, the range of incidence angles $\varphi$ for which the quantity T has large enough values is limited and strongly depends on the particles energy. There is so called critical angle φc in the spectra, that is the angle for which the electrons that fall on the junction at angles $\varphi > \varphi_c$ cannot penetrate through the barrier, and T ($\varphi > \varphi_c$)=0.

At the energy range which is close to the electrostatic barrier ceiling, the gap is observed and its value grows rapidly with the angle $\varphi$ enlargement. The magnetic field (the magnetic barrier) leads to the asymmetry of the spectra with respect to the zero angle of incidence. Also, the change of the incidence angle values as well as the lessening of the transmission rates absolute values takes place.

**DOI:** 10.24263/2225-2924-2019-25-1-16

# ТРАНСПОРТ КВАЗІЕЛЕКТРОНІВ ДІРАКА КРІЗЬ СХОДИНКОПОДІБНИЙ ПОТЕНЦІАЛЬНИЙ БАР'ЄР У 3D ТОПОЛОГІЧНОМУ ІЗОЛЯТОРІ

**А.М. Король, Н.В. Медвідь, І.В. Гуцало, В.М. Ісай**
*Національний університет харчових технологій*

*Об'єктом дослідження є сучасна наноструктура, яка складена із топологічних ізоляторів — матеріалу, що активно вивчається останніми роками.*

*Розраховано коефіцієнт трансмісії T квазіелектронів у сучасній наноструктурі залежно від їхньої енергії. Для цього розв'язується рівняння діраківського типу з відповідним гамільтоніаном. Коефіцієнт трансмісії знаходиться за допомогою зшивання власних функцій на межі розділу топологічних ізоляторів. У розрахунках і аналізі враховується дія на контакт зовнішніх електростатичного та магнітного потенціалів, в результаті чого один із топологічних ізоляторів являє собою сходинкоподібний потенціальний бар'єр. При врахуванні дії магнітного поля використано калібрування Ландау. Електростатичне і магнітне поля вважаються однорідними, тобто бар'єр є прямокутним.*

*Показано, що розглядуваний контакт не є тунельно-резонансною структурою. Спектри трансмісії, тобто залежності коефіцієнта T від кута падіння квазіелектронів на контакт та від енергії істотно залежать від величини* $\alpha = v_2 / v_1$*, де* $v_1, v_2$ *— швидкості Фермі в першому і другому ізоляторах. Для значень* $\alpha > 1$ *область кутів падіння* $\varphi$*, для яких величина T має досить великі значення, є обмеженою і сильно залежить від енергії частинок. У спектрах існує так званий критичний кут* $\varphi_c$*, такий що для квазіелектронів, які падають на контакт під кутами* $\varphi > \varphi_c$ *бар'єр є абсолютно непроникним , тобто T (*$\varphi > \varphi_c$*)=0.*

*В області енергій, що близькі до межі електростатичного бар'єра, в спектрах спостерігається заборонена зона, величина якої різко зростає із збільшенням кута падіння* $\varphi$*. Магнітне поле (магнітний бар'єр) приводить до асиметрії в спектрах T(*$\varphi$*) відносно нульового кута падіння. Також під впливом магнітного поля відбувається зміна значень критичних кутів падіння та зменшення абсолютних значень коефіцієнта трансмісії.*

***Ключові слова:*** *графен, наноструктури, швидкість Фермі, рівняння Дірака-Вейля, коефіцієнт трансмісії.*

**Постановка проблеми.** Топологічні ізолятори (ТІ) являють собою новий клас речовин, які активно вивчаються протягом останніх років, і їхні нетривіальні властивості привертають до себе пильну увагу дослідників [1—9]. Найважливішою характеристикою ТІ є те, що вони є ізоляторами у своєму об'ємі, але здатні проводити електричний струм на своїй поверхні. Їхні поверх-

неві стани за умови низьких енергій описуються безмасовим рівнянням діраківського типу, аналогічним до рівняння для квазіелектронів у графені. Закон дисперсії в цьому разі, як відомо, являє собою конус у тривимірному випадку. Деякі властивості поверхневих станів ТІ виражаються в термінах топологічно інваріантних величин і, що вельми важливо, захищені від впливу різного роду збурень завдяки симетрії інверсії часу у відповідному гамільтоніані. Саме через цю обставину до транспортних властивостей ТІ прикута особлива увага.

**Огляд останніх досліджень і публікацій.** Квазіелектрони в ТІ виявляють сильну спін-орбітальну взаємодію. Напрямки лінійного квазіімпульсу і спін-кутового квазіімпульсу пов'язані між собою, лежать у площині поверхні і перпендикулярні один до одного. Є два класи топологічних ізоляторів: дво- і тривимірні ТІ. Перші з них називають також квант-спіновими холівськими діелектриками, і вони можуть реалізуватись у квантових ямах сполук Hg Cd Te. Тривимірні (3D) ТІ представлені сполуками вісмуту: $Bi_2Se_3$, $Bi_2Te_3$ і подібними матеріалами.

Останнім часом значна увага приділялась вивченню транспортних властивостей у контактних системах, однією із складових яких є ТІ [6—9]. Найпростіша структура представлена планарним контактом двох різних ТІ. Адже швидкості Фермі в різних ТІ мають неоднакові значення, що може істотно вплинути на провідність системи. Імовірність цього тим більша, що в графенових структурах, подібних до структур, складених із ТІ, вплив швидкості Фермі на їх електрофізичні властивості є вельми істотним [10].

**Мета дослідження**: теоретично проаналізувати особливості транспорту релятивістських квазіелектронів Дірака в планарному контакті двох ТІ з урахуванням можливості існування як електростатичного, так і магнітного сходинкоподібного бар'єру, а також бар'єрів швидкості Фермі.

**Викладення основних результатів дослідження.** Розглянемо квантову структуру, яка складається з двох топологічних ізоляторів ТІ1 і ТІ2, що межують між собою по лінії розподілу $z = 0$. Матеріал ТІ2 розміщений в області $z > 0$ і має швидкість Фермі $v_2$. В області $z > 0$ є потенціальний бар'єр електростатичної або магнітної природи (або подвійної). Вважаємо, що відповідні поля в області $z > 0$ є однорідними; згідно з калібруванням Ландау, значення векторного потенціалу $A_x$ є однаковим вздовж осі $Oz$. Тож область $z > 0$ можна вважати сходинкоподібним бар'єром. Квазіелектронна хвиля падає на ТІ1 і, здолавши межу розділу ТІ1—ТІ2, рухається в бар'єрній області $z > 0$.

Гамільтоніан системи можна записати у такому вигляді:

$$H = \begin{pmatrix} V & k_x + A_x + ik_z \\ k_x + A_x - ik_z & V \end{pmatrix}, \qquad (1)$$

де $V$ — висота електростатичного бар'єру; $A_x$ — значення векторного потенціалу вздовж осі $Ox$, $k_x$ і $k_z$ — складові квазіімпульсу електронів по осях $Ox$ і $Oz$ відповідно.

Хвильові функції, які задовольняють гамільтоніан (1), є спінорами другого порядку і мають вигляд:

$$\Psi_{in}(x,z)=\frac{1}{\sqrt{2}}e^{ik(x\sin\varphi+z\cos\varphi)}\begin{pmatrix}1\\ e^{-i\varphi}\end{pmatrix}$$

$$\Psi_{r}(x,z)=\frac{1}{\sqrt{2}}e^{ik(x\sin\varphi-z\cos\varphi)}\begin{pmatrix}1\\ e^{-i\varphi}\end{pmatrix},\ z<0 \qquad (2)$$

$$\Psi_{t}(x,z)=\frac{1}{\sqrt{2}}e^{iq(x\sin\theta+z\cos\theta)}\begin{pmatrix}1\\ e^{-i\theta}\end{pmatrix},\ z>0,$$

де $\varphi,\theta$ — кути падіння і заломлення електронної хвилі відповідно; $k$і $q$ — квазіімпульси в областях ТІ1 і ТІ2 відповідно.

Із закону неперервності струму випливає така гранична умова для хвильових функцій:

$$\sqrt{\vartheta_1}\left[\psi_{in}\left(x,z=0^-\right)+\psi_r\left(x,z=0^-\right)\right]=\sqrt{\vartheta_2}\,\psi_t\left(x,z=0^+\right). \qquad (3)$$

Використовуючи цю граничну умову для коефіцієнта трансмісії квазіелектронів крізь систему, що розглядається, одержимо вираз:

$$T=\frac{\cos\varphi\cos\theta}{\cos\dfrac{\varphi+\theta}{2}}. \qquad (4)$$

Величини $\varphi$ і $\theta$ пов'язані між собою через умову збереження $x$-го компонента квазіімпульсу:

$$\theta=\arcsin\left(\sin\varphi\frac{\alpha E}{E-V}+\frac{\alpha A}{E-V}\right), \qquad (5)$$

де через $\alpha$ позначено відношення швидкостей $v_2/v_1$; $A=A_x$.

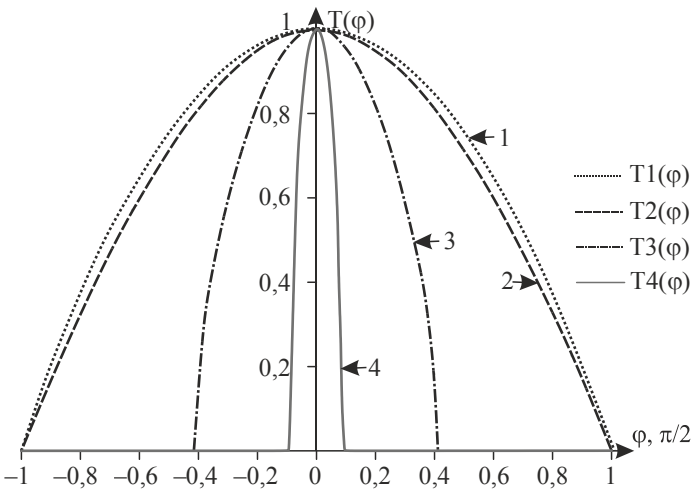


**Рис. 1. Функція Т(φ) за відсутності магнітного поля**

Значення параметрів для функцій є такими: для функцій Т1(φ)—Т3(φ) — $V=4$, $A=0$, $E=1$, $\alpha=0{,}2$, 1, 1 відповідно; для кривої Т4(φ) — $\alpha=0{,}2$, $E=4{,}1$

Перш за все варто зазначити, що структура, яка розглядається, не є тунельно-резонансною (як більшість бар'єрних наноструктур, що наразі активно вивчаються). Спектри залежностей $T(\varphi)$ і $T(E)$, представлені на рис. 1 і 2 відповідно, являють собою гладкі лінії і не мають резонансних піків.

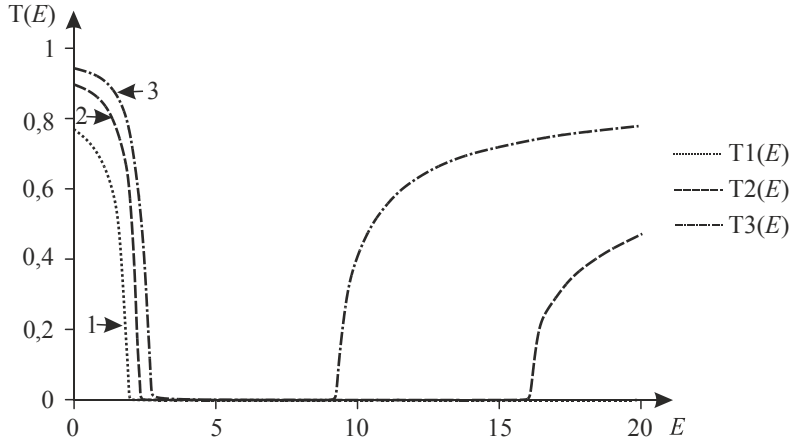


**Рис. 2. Функція T(*E*) за відсутності магнітного поля.** Значення параметрів функцій T1—T3 є такими: $V = 4$, $A = 0$, $\alpha = 1{,}5$, $\varphi = \pi/4, \pi/6, \pi/8$ відповідно

У разі відсутності магнітного поля ($A = 0$) всі спектри $T(\varphi)$ є симетричними відносно кута падіння $\varphi = 0$, тобто є однаковими в інтервалах $-\frac{\pi}{2} < \varphi < 0$ і $\frac{\pi}{2} > \varphi > 0$. Спектри, які відповідають значенням $\alpha < 1$, мало відрізняються один від одного, тобто слабко залежать від значень $\alpha < 1$. Це пояснюється тим, що ці значення $\alpha$ ($\alpha < 1$) асоціюються з утворенням квантових ям, пов'язаних із швидкістю Фермі, так що вплив електростатичних бар'єрів на формування спектрів є домінантним.

Для значень $\alpha < 1$ область кутів падіння $\varphi$, для яких величина T має досить великі значення, є обмеженою. Ця область істотно залежить від значень енергії квазіелектронів $E$ і від величини $\alpha$, оскільки звужується із зростанням як $E$, так і $\alpha$.

У спектрах існує так званий критичний кут $\varphi_k$, через що для електронів, які падають на структуру під кутами $\varphi > \varphi_k$, бар'єр є непроникним, тобто $T(\varphi > \varphi_k)=0$. Значення критичного кута можна знайти із закону Снела:

$$k \sin\varphi = q \sin\theta, \tag{6}$$

і воно дорівнює:

$$\varphi_k = \pm \arcsin \frac{|E - V|}{\alpha E}. \tag{7}$$

Значення критичного кута $\varphi_k$ зменшується із зростанням $\alpha$ і є чутливим до енергії електронів $E$ і висоти електростатичного бар'єру $V$.

Для значень $\alpha < 1$ критичного кута не існує, і величина Т є значно більшою від нуля в усьому діапазоні кута $\varphi$: $-\frac{\pi}{2} < \varphi < \frac{\pi}{2}$ . Зауважимо, що для значень енергії, близьких до межі бар'єра $E \sim V$, є лише вузький інтервал значень кутів $\delta\varphi$, в якому коефіцієнт трансмісії помітно відрізняється від нуля (крива 4, рис. 1). Це пояснюється законом дисперсії для квазіелектронів в області TI2:

$$E = V + \alpha\sqrt{q_z^2 - (k_x + A)^2} \ . \tag{8}$$

Із закону випливає таке міркування: коли значення енергії $E$ стає близьким до висоти потенціального бар'єра $V$ ($E \sim V$), квазіімпульс $q_z$ може стати уявним, а отже, відповідна електронна хвиля стає згасаючою. Тож при збільшенні $E$ від 0 до $V$ інтервал кутів $\varphi$, для яких значення Т є достатньо великими, звужується і зрештою досягає мінімуму в точці $E = V$. При подальшому зростанні енергії за умови, що $E > V$, цей інтервал зростає, але не виходить за межі певної області; для більших значень $\alpha$ ця область зменшується.

Цікавою обставиною для структури, яка розглядається, є те, що величина коефіцієнта трансмісії є високою у випадку низьких енергій, в тому числі і коли $E = 0$ (див. рисунки).

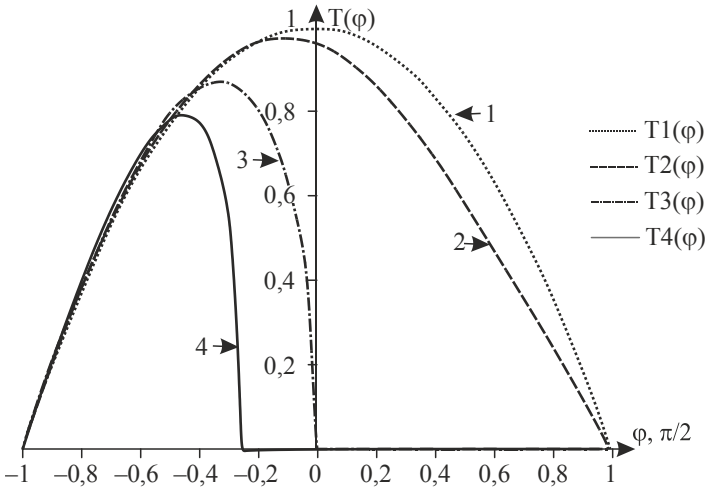


**Рис. 3. Функція Т( φ ) за наявності магнітного поля.** Значення параметрів функцій Т1—Т4 є такими: $V = 4$, $A = 1$, $E = 1$, $\alpha = 0{,}2$; 1; 3; 5 відповідно

На рис. 2 представлено залежність коефіцієнта трансмісії Т від енергії квазічастинок $E$. Видно, що в області енергій $E \sim V$, тобто коли енергія близька до висоти бар'єра, в спектрі утворюється заборонена зона. Її величина сильно залежить від кута падіння $\varphi$, різко збільшуючись із його зростанням (криві 2.1 і 2.2). Коли ж кут $\varphi$ стає достатньо великим і досягає критичного значення, то йому відповідає критична енергія $E_k$, для значень енергії $E > E_k$ коефіцієнт

$T = 0$, тобто бар'єр стає непрозорим. Причина виникнення забороненої зони також пов'язана із законом дисперсії — аналогічно до випадку звуження інтервалу кутів із нульовими значеннями $T$, коли м ~ $V$. Тут так само, коли $E > E_k$, електронна хвиля стає згасаючою, і $T = 0$.

Розглянемо тепер дію магнітного бар'єра на транспортні властивості квазіелектронів. Ця дія є принципово відмінною від дії електростатичного бар'єру і бар'єру швидкості Фермі.

1. Перш за все підкреслимо, що магнітне поле порушує симетрію в спектрах $T(\varphi)$ відносно нульового кута падіння: спектри під дією магнітного поля стають асиметричними, тобто частина спектра в області кутів падіння $-\frac{\pi}{2} < \varphi < 0$ не є ідентичною до частини спектра в інтервалі кутів $0 < \varphi < \frac{\pi}{2}$. Цей факт, який істотно відрізняє спектри для магнітних бар'єрів від спектрів для електростатичних бар'єрів і бар'єрів швидкості Фермі, пояснюється тим, що магнітне поле, як відомо, порушує симетрію відносно інверсії часу у відповідних гамільтоніанах.

Рисунки показують, що максимуми коефіцієнта трансмісії T зсуваються від точки $\varphi = 0$; для переважної більшості параметрів цей зсув відбувається в бік від'ємних кутів (ліворуч на рисунках).

2. Другою важливою обставиною, пов'язаною з існуванням магнітних бар'єрів, є факт зменшення амплітуди коефіцієнта трансмісії $T$ із збільшенням магнітного поля (векторного потенціалу $A$). Зокрема, на рисунках видно, що максимальні значення T зменшуються.

3. Також під дією магнітного поля відбувається зміна значень критичних кутів, що ілюструється рисунками. Залежність значень критичних кутів від магнітного поля дається формулою:

$$\varphi_k = \pm \arcsin\left(\frac{|E - V|}{\alpha E} - \frac{A}{E}\right). \tag{9}$$

4. Для випадку $\alpha < 1$ і $V \neq 0$, тобто у разі наявності електростатичних бар'єрів і бар'єрів швидкості Фермі із значенням $\alpha < 1$, вплив магнітного поля на спектри є доволі слабким; тут домінують бар'єри іншої природи і для помітної зміни спектрів потрібні великі значення векторного потенціалу $A$.

5. Цікавим фактом є те, що за певного підбору значень параметрів задачі ненульові значення коефіцієнта трансмісії T можуть займати область кутів $0 < \varphi < \frac{\pi}{2}$, і лише її ( в області $-\frac{\pi}{2} < \varphi < 0$ T = 0) (див. рис. 4). До того ж коефіцієнт трансмісії в точці $\varphi = 0$, тобто у разі нормального падіння квазіелектронної хвилі на структуру, може дорівнювати нулеві.

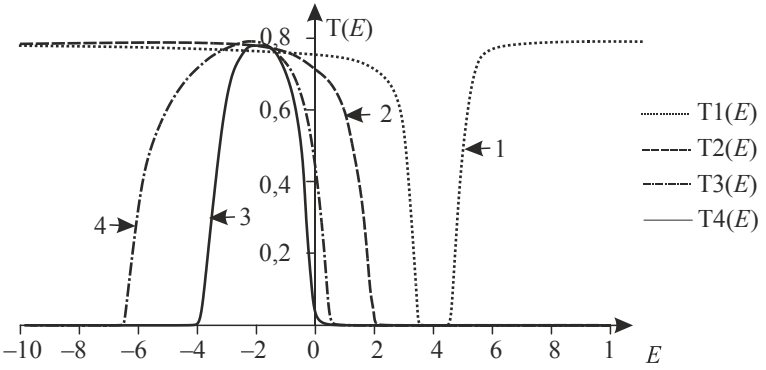


**Рис. 4. Функція T( *E* ) за наявності магнітного поля.** Значення параметрів функцій T1—T4 є такими: $V = 4$, $A = 1$, $\varphi = \pi/4$, $\alpha = 0{,}2$; 1; 3; 5 відповідно

## Висновки

У результаті використання ефективного гамільтоніану методом трансферних матриць у континуальній моделі теоретично розраховано і проаналізовано коефіцієнт трансмісії квазіелектронів Дірака для випадків існування сходинкоподібних електростатичного, магнітного бар'єрів, а також бар'єру швидкості Фермі в планарному контакті двох топологічних ізоляторів. Показано, що коефіцієнт трансмісії, а отже, і електропровідність системи суттєво залежать від швидкості Фермі в бар'єрній області та від значень скалярного і векторного потенціалів. Структура, складена із двох тривимірних топологічних ізоляторів, дає змогу регулювати транспорт носіїв заряду у широких межах і тому має добрі перспективи для застосування в сучасній наноелектроніці з використанням тривимірних топологічних ізоляторів.

## Література

1. Tanaka Y., Yokohama T., Nagaosa N. Manipulation of the Majorana Fermion, Andreev reflection, and Josephson Curr2ent on Topological Insulators. *Phys. Rev*. 2009. 103. P. 107002—107009.

2. Fu L. Hexagonal Warping Effects in the Surface States of the Topological Insulator $Bi_2Te_4$. *Phys. Rev*. 2009. 103. P. 266801—266808.

3. Takahashi R., Murakami S. Gapless Interface States between Topological Insulators with Opposite Dirac Velocities. *Phys. Rev*. 2011. 107. P. 166805—166815.

4. Iurov A., Gumbs G., Roslyak O., Huang D. Anomalous photon-assisted tunneling in grapheme. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2012. №24. P. 015303—015311.

5. Iurov A., Gumbs G., Roslyak O., Huang D. Photon dressed electronic states in topological insulators: tunneling and conductance. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2013. No. 25. P. 135502—135515.

6. Alos-Palop M., Rakesh P., Blaauboer M. Suppression of conductance in a topological insulator nanostep junction. *Phys. Rev*. 2013. B 87. P. 035432—035439.

7. Li H., Shao J., Zhang H., Dao-Xin Y., Yang G. Resonant tunneling in a topological insulator super lattice. *Journal of Applied Physics*. 2013. 114. P. 093703—093710.

8. Takagaki Y. Klein tunneling of helical edge states in narrow strips of a two—dimensional topological insulator. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2016. No. 28. P. 025302—025307.

9. Zheng Y., Song J., Li Y. Suppression of Andreev conductance in a topological insulator—superconductor nanostep junction. *Chin. Phys*. 2016. 25. P. 037301—037305.

10. Korol A., Sokolenko A., Sokolenko I. The energy spectra of the graphene-based quasi-periodic superlattice. *Low Temperature Physics*. 2018. No. 44(8). P. 803—809.