

Механизмы рассеяния поверхностных электронов в топологических изоляторах

Ю.В. Топоров

Киевский национальный университет им. Тараса Шевченко, ул. Владимирская, 60, г. Киев, 01033, Украина
E-mail: toporov94@gmail.com

А.А. Кордюк

Киевский академический университет, бульв. Вернадского, 36, г. Киев, 03142, Украина
Институт металлофизики им. Г.В. Курдюмова НАН Украины
бульв. Вернадского, 36, г. Киев, 03142, Украина
E-mail: kordyuk@gmail.com

Статья поступила в редакцию 14 мая 2018 г., после переработки 3 августа 2018 г.,
опубликована онлайн 26 ноября 2018 г.

Особенностью топологических изоляторов является наличие электронных, топологически защищенных квазичастичных поверхностных состояний, исключительно устойчивых к наличию примесей, однако структура спектра рассеяния поверхностных квазичастиц изучена слабо. Цель работы — определение структуры собственной энергии поверхностных состояний из анализа фотоэмиссионных спектров. В частности, детально исследовано уширение этих состояний в зависимости от энергии связи в Bi_2Se_3 и $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$ — наиболее изученных топологических изоляторах. Выявленная ступенчатая структура уширения позволила выделить вклады упругого и неупругого межзонного рассеяния (поверхность–объем) в квазичастичную собственную энергию и показать, что оно сравнимо с упругим внутризонным рассеянием.

Ключевые слова: топологический изолятор, ARPES спектр, рассеяние электронов.

Введение

Топологические защищенные состояния на поверхности объемных изоляторов возможны благодаря комбинации спин-орбитального взаимодействия и симметрии относительно инверсии времени [1]. Существование таких состояний позволяет топологическому изолятору проводить ток на поверхности, оставаясь диэлектриком в объеме. При этом поверхность остается металлической даже при очень сильном разупорядочении, например, при рассеянии носителей заряда на примесях и дефектах. Это было экспериментально продемонстрировано, используя сканирующую туннельную спектроскопию [2] и фотоэмиссионную спектроскопию с угловым разрешением (Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy — ARPES) [3,4], которая идеально подходит для изучения поверхностных состояний [5]. Топологическая инвариантность может быть использована в создании квантовых компьютеров, а именно: на основе фермионов Майораны, которые являются чрезвычайно

устойчивыми к шумам и воздействию окружающей среды, и их можно было бы использовать для надежного хранения и передачи информации [1].

Очевидно, что основой эффективного использования топологических изоляторов должно быть понимание механизмов рассеяния этих «топологически защищенных» поверхностных состояний. И можно было бы ожидать, что эти механизмы будут достаточно быстро идентифицированы в прямых ARPES экспериментах [5], например, путем анализа структуры собственной энергии квазичастиц, как это было сделано в случае сверхпроводящих купратов [6,7]. Однако работ по исследованию структуры собственной энергии в топологических изоляторах опубликовано немного [8], что связано с малым затуханием (ширина спектров, пропорциональна затуханию и сравнима с экспериментальным разрешением), а также с влиянием объемных состояний, которые усложняют анализ спектров [5].

Поверхностные состояния имеют большое время жизни, так как они являются спин-поляризованными [1].

Чтобы электрон перешел в другое поверхностное состояние нужно, чтобы его спин изменил свое направление. Вероятность этого процесса очень мала. С другой стороны, ничто бы не мешало рассеяться электрону в объемное состояние, где нет топологической защищенности. Однако поверхностные и объемные состояния в кристалле пространственно разделены, область перекрытия невелика. С помощью детального анализа ARPES спектров можно выявить, насколько эти два состояния влияют друг на друга, оценив относительную вероятность межзонных и внутризонных переходов.

В настоящей работе, используя ARPES спектры с улучшенной статистикой, исследовали корреляцию поверхностных и объемных состояний селенида висмута Bi_2Se_3 и соединения с теллуром $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$ путем изучения структуры квазичастичного рассеяния. Найдены вклады упругого и неупругого рассеяния в квазичастичную собственную энергию, которые определяют время жизни топологических состояний.

Методика эксперимента

ARPES спектр отражает вероятность нахождения в кристалле электрона с энергией ω и импульсом \mathbf{k} и перевода его в возбужденное состояние. Первый процесс определяется плотностью заполненных состояний, или спектральной функцией, умноженной на распределение Ферми: $A(\omega, \mathbf{k})f(\omega)$. Второй — вероятностью поглощения фотона, или прямого перехода на свободный уровень (в трехшаговой модели фотоэмиссии он определяет «матричные элементы» $M(\hbar\nu, n, \mathbf{k})$). Таким образом, структура ARPES спектра, которая состоит из n зон, в координатах (ω, \mathbf{k}) выглядит так:

$$\text{ARPES}(\omega, \mathbf{k}) \propto \sum_n M(\hbar\nu, n, \mathbf{k}) A(\omega, \mathbf{k}) f(\omega). \quad (1)$$

Спектральная функция $A(\omega, \mathbf{k})$ содержит информацию о свойствах электронной подсистемы и является основной целью фотоэмиссионных исследований. При этом ее структура может быть представлена в виде [9,10]

$$A(\omega, \mathbf{k}) = -\frac{1}{\pi} \frac{\Sigma''(\omega, \mathbf{k})}{(\omega - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma'(\omega, \mathbf{k}))^2 + (\Sigma''(\omega, \mathbf{k}))^2}. \quad (2)$$

Тут $\varepsilon(\mathbf{k})$ — «голая» дисперсия, которая определяется упругим взаимодействием электронов с кристаллической решеткой, а комплексная собственная энергия Σ — взаимодействием электронов с другими электронами или другими степенями свободы в кристалле (фононы, спиновые флуктуации) и содержит, таким образом, всю информацию о свойствах одночастичных возбуждений в коррелируемых системах. Действительная часть определяет дисперсию частиц, а мнимая — затухание или, иначе говоря, время жизни.

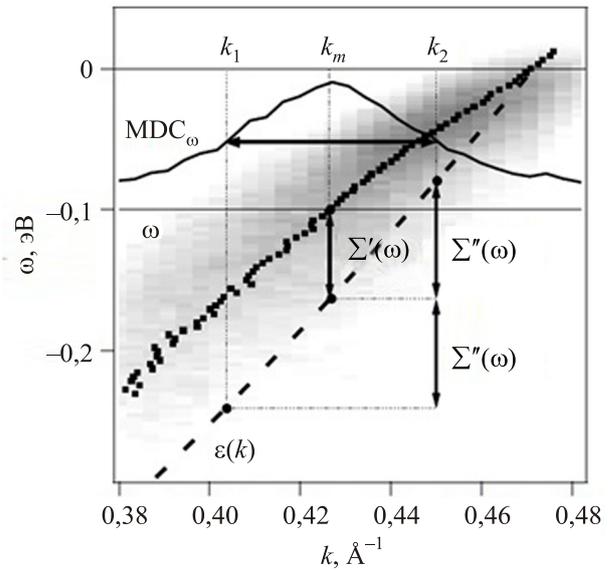


Рис. 1. Различие между «голой» и экспериментальной дисперсией. Также показана взаимосвязь между MDC и составляющими собственной энергии [5,11].

Зависимость мнимой части величины $\Sigma = \Sigma' + i\Sigma''$ от энергии является предметом исследования в настоящей работе. Рисунок 1 иллюстрирует, как эти величины могут быть определены из экспериментального спектра [5].

Для получения зависимости Σ'' использовался анализ кривых распределения по импульсу (MDC) [10], пример которой показан на рис. 1 [5,11]. Каждая MDC функция от энергии Ферми до точки Дирака аппроксимировалась лоренцианом, положения пиков и значения полуширин которого соответствуют зависимостям дисперсии и квазичастичного затухания от энергии квазичастиц.

Пример кривой распределения по импульсу MDC(k) представлен на рис. 2. Составляющие аппроксимирующей функции MDC_fit(k) изображены пунктирными линиями:

$$\begin{aligned} \text{MDC_fit}(k) &= Q(k) + L1(k) + L2(k) = \\ &= (Q_1 k^2 + Q_0) + \frac{A_1 W_1^2}{(k - k_1)^2 + W_1^2} + \frac{A_2 W_2^2}{(k - k_1)^2 + W_2^2}, \quad (3) \end{aligned}$$

где $Q_0, Q_1, A_1, A_2, W_1, W_2, k_1$ и k_2 — параметры аппроксимации.

Аппроксимирующая функция представляет простейшую, физически обоснованную модель фотоэмиссионных спектров [5,11] и состоит из трех слагаемых, содержащих минимально необходимый набор параметров. Первое слагаемое $Q(k) = (Q_1 k^2 + Q_0)$ определяет фон. Тут выбрана квадратичная функция, так как фон должен влиять симметрично на электроны с импульсами противоположных знаков. Второе слагаемое

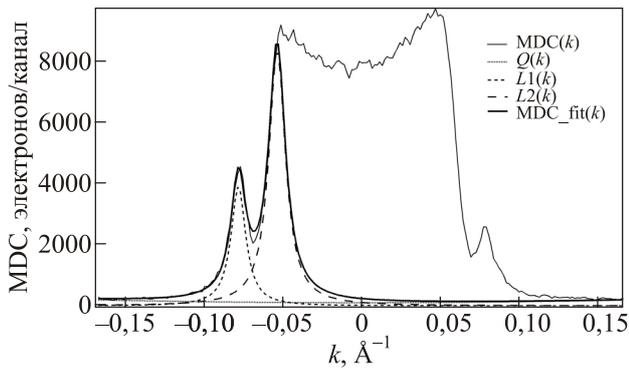


Рис. 2. Кривая распределения по импульсу и составляющие аппроксимирующей ее функции.

$L1(k)$ является лоренцианом зоны поверхностных состояний, параметры которого k_1 и W_1 определяют ренормированную дисперсию поверхностных состояний и мнимую часть собственной энергии соответственно.

Третье слагаемое $L2(k)$ также представлено лоренцианом и используется для учета влияния зоны объемных состояний. Поскольку целью данной работы было выделение и последующий анализ $W_1(\omega)$, структура аппроксимирующей функции была оптимизирована именно для определения этого параметра, а роль остальных слагаемых сводилась к улучшению точности аппроксимации в окрестности пика поверхностных состояний. В частности, разница в значениях W_1 с учетом третьего слагаемого и без него составляет около 8%, однако разница при учете второго слагаемого в форме лоренциана или, например, гауссиана, составляет менее 2%, что уже достаточно для достоверной идентификации особенностей, обсуждаемых в настоящей статье. Таким образом, хотя чувствительность $W_1(\omega)$ к вариации параметров незначительна, однако их учет необходим для точного определения параметров поверхностных состояний.

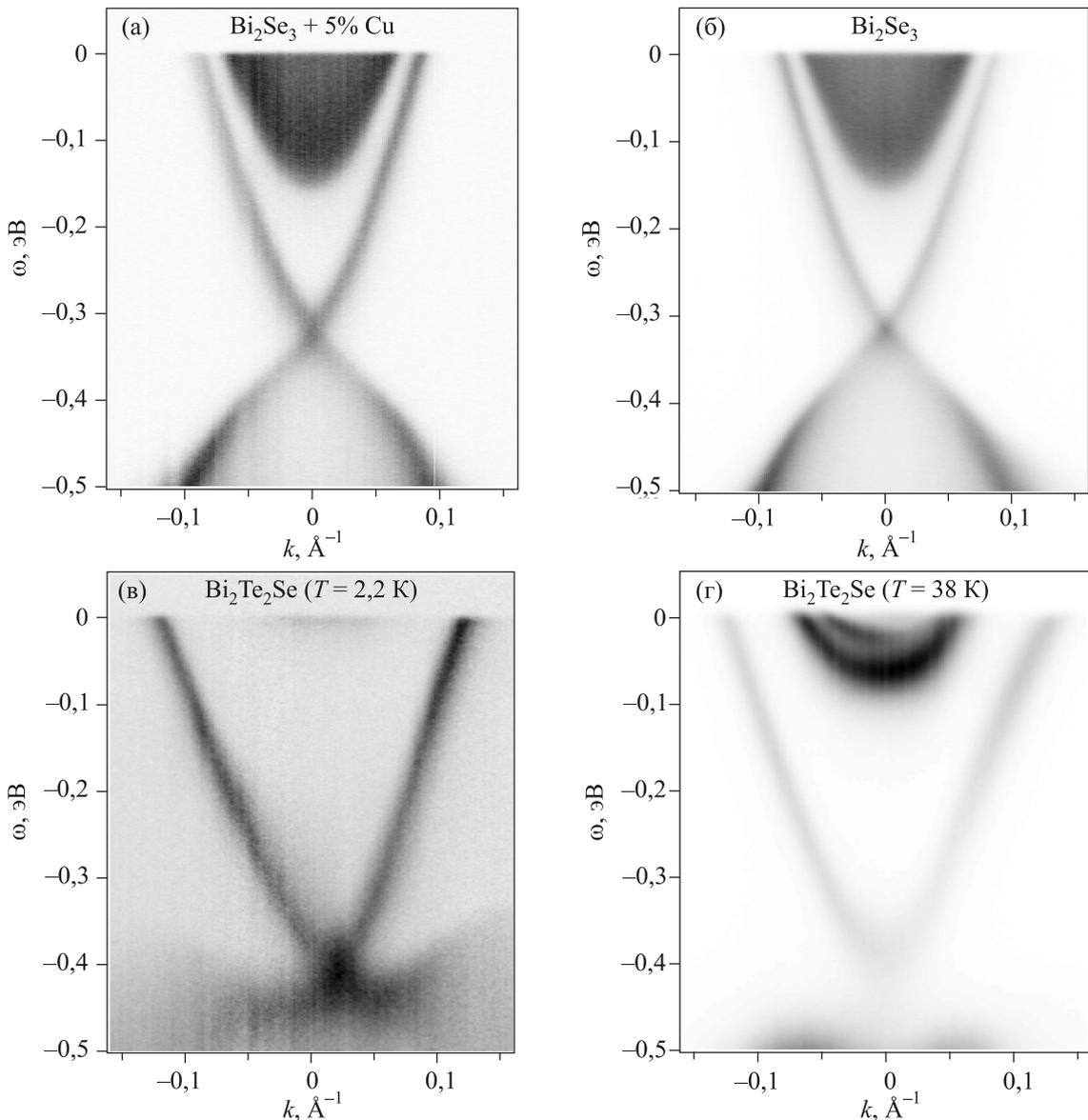


Рис. 3. Типичные ARPES спектры поверхностных состояний в топологических изоляторах.

Зависимость Σ'' от энергии строится по формуле

$$\Sigma'' = W_1(\omega)v_F. \quad (4)$$

Тут $W_1(\omega)$ — зависимость, полученная аппроксимацией экспериментальных МДС к формуле (3), v_F — скорость Ферми (производная энергии по импульсу, которая находится с помощью аппроксимации дисперсионной кривой полиномом).

Результаты и обсуждение

На рис. 3 изображены ARPES спектры, которые анализировались в работе. Все спектры были получены на синхротроне BESSY на станциях «1[^]2» и «1[^]3» [8,12,13].

На спектрах видны ветки поверхностных состояний и между ними зоны объемных состояний, влияние которых исследуется в настоящей работе. На рис. 3(в) зона объемных состояний почти не видна, что обусловлено влиянием матричных элементов.

Дисперсионные зависимости, полученные после аппроксимации, изображены на рис. 4. Можно заметить, что дисперсии двух топологических изоляторов существенно отличаются. Это обусловлено разной концентрацией поверхностных электронов.

На рис. 5 изображена кривая квазичастичного затухания $\Sigma''(\omega)$, полученная из анализа первого спектра (рис. 3(а)). График предварительно был сглажен для того, чтобы выделить характерные области. Можно выделить две характерных ступеньки, которые, по-видимому, соответствуют границам двух вкладов в квазичастичное затухание, которое включает в себя как внутризонное (поверхность–поверхность), так и межзонное (поверхность–объем) рассеяние поверхностных квазичастиц на примесях, фонах и в результате электрон-электронного взаимодействия. Соответствующие вклады обозначены на рис. 5.

Рассеяние на примесях пропорционально плотности электронных состояний, поэтому первая ступенька в рассеянии (1 на рис. 5) может быть связана только с

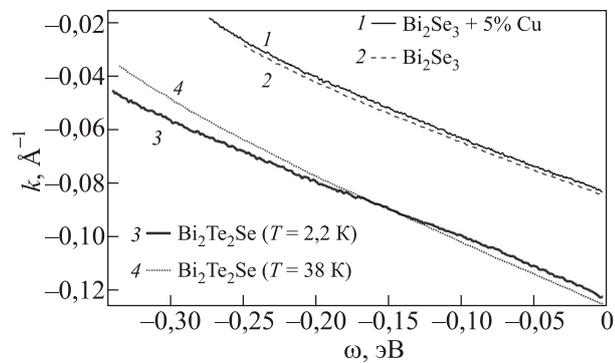


Рис. 4. Дисперсионные зависимости топологических изоляторов.

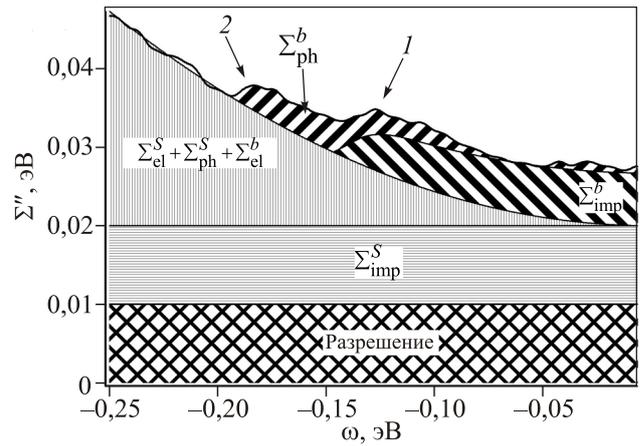


Рис. 5. Составляющие квазичастичного рассеяния для первого спектра. Рассеяние поверхностных электронов: на фонах в объемное состояние Σ_{ph}^b , на примесях в объемное состояние Σ_{imp}^b , на электронах в поверхностное и объемное состояния и на фонах в поверхностное состояние $\Sigma_{el}^S + \Sigma_{ph}^S + \Sigma_{el}^b$, на примесях в поверхностное состояние Σ_{imp}^S , разрешающая способность прибора (Разрешение).

краем объемной зоны проводимости и, соответственно, описываться зависимостью Σ_{imp}^b .

Спектр электрон-фононного взаимодействия ограничен частотой Дебая [14], поэтому его вклад тоже должен иметь форму ступеньки: Σ_{ph}^b будет сверткой фононного спектра и плотности состояний объемной зоны и, следовательно, начало поглощения будет смещено по энергии на частоту Дебая, что хорошо объясняет вторую ступеньку (2 на рис. 5). Поскольку фононный спектр имеет ярко выраженные пики, соответствующие оптическим фононам, ожидается появление этой структуры и при затухании. Однако для установления данного соответствия требуется лучшая статистика.

Оставшиеся вклады в затухание связаны с электрон-электронным рассеянием, которое приводит к квадратичной зависимости $\Sigma''(\omega)$, поэтому сумма $\Sigma_{el}^S + \Sigma_{ph}^S + \Sigma_{el}^b$ может быть аппроксимирована квадратичной функцией, как показано на рис. 5.

Для подтверждения предположения о происхождении ступенек на графике $\Sigma''(\omega)$ проанализированы спектры других образцов, которые изображены на рис. 3. На рис. 6 приведены кривые квазичастичного затухания для Bi_2Se_3 и Bi_2Te_2Se .

Для селенида висмута (рис. 6, кривые а и б) предположение о происхождении ступенек подтверждено, сдвиг ступенек обусловлен изменением химического потенциала из-за легирования медью первого образца (рис. 6, кривая а). Этот небольшой сдвиг при сохранении общей формы зависимости подтверждает тот факт, что характер рассеяния не меняется при легировании.

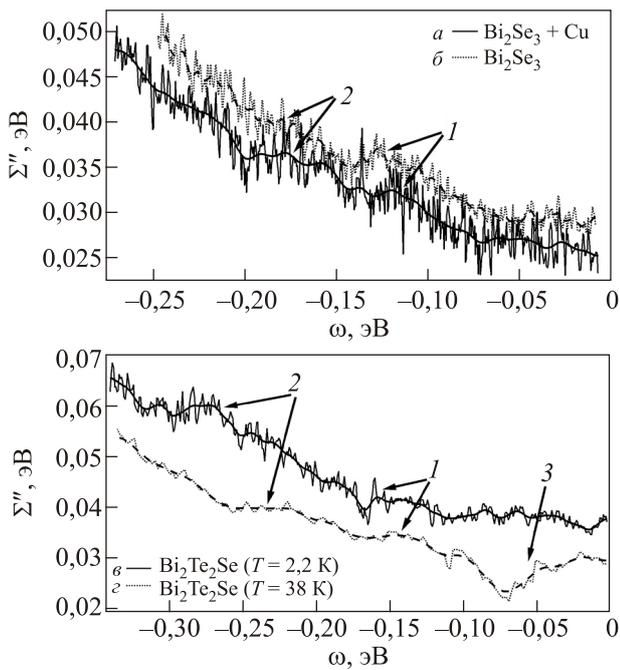


Рис. 6. Кривые квазичастичного затухания $\Sigma''(\omega)$ для Bi_2Se_3 (кривые а и б) и $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$ (кривые в и з).

Для $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$ различия между кривыми квазичастичного рассеяния являются более заметными. Измерения проводились на одном образце в разное время и при разных условиях. Со временем в этих соединениях на поверхности образуется двумерный электронный газ с поверхностной деградацией [4,15]. Результат появления двумерного электронного газа показан на рис. 3(г) как параболическая дисперсия поверх объемных состояний. На кривой квазичастичного рассеяния этот эффект можно наблюдать как увеличение Σ'' возле точки Ферми (3 на рис. 6, кривая з), это является результатом рассеяния поверхностных электронов на фононах в объемные и поверхностные состояния двумерного электронного газа. Ступенька 1 так же, как и для Bi_2Se_3 , объясняется рассеянием в объемное состояние на примесях. Фононное взаимодействие представляет собой свертку фононного спектра и плотности электронных состояний, поэтому в этом случае начало затухания сдвигается на 0,1 эВ влево по сравнению со ступенькой 1 (второй пик на -0,22 эВ), что является характерной энергией фононов. На рис. 6, кривая в вторая ступенька ($\omega = -0,30$ эВ) не связана с фононным взаимодействием (расстояние до второго шага составляет более 0,15 эВ), так как данная энергия превышает возможную энергию фононов. Объяснение этой особенности требует дальнейших исследований.

Выводы

Используя улучшенную процедуру аппроксимации ARPES спектров, показано, что время жизни поверхностных топологических состояний в топологических

изоляторах на основе Bi_2Se_3 и $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$ коррелирует с плотностью объемных электронных состояний и фононным спектром. А именно, появление ступенек обусловлено рассеянием поверхностных электронов на примесях и фононах в объемные состояния. Можно также утверждать, что оба межзонных вклада сравнимы с упругим внутризонным рассеянием поверхностных квазичастиц.

1. M.Z. Hasan and C.L. Kane, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 3045 (2010).
2. P. Roushan, J. Seo, C.V. Parker, Y.S. Hor, D. Hsieh, D. Qian, A. Richardella, M.Z. Hasan, R.J. Cava, and A. Yazdani, *Nature* **460**, 1106 (2009).
3. D. Hsieh, Y. Xia, D. Qian, L. Wray, J.H. Dil, F. Meier, J. Osterwalder, L. Patthey, J.G. Checkelsky, N.P. Ong, A.V. Fedorov, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y.S. Hor, R.J. Cava, and M.Z. Hasan, *Nature* **460**, 1101 (2009).
4. M. Bianchi, D. Guan, S. Bao, J. Mi, B.B. Iversen, P.D.C. King, and P. Hofmann, *Nat. Commun.* **1**, 128 (2010).
5. А.А. Кордюк, *ФНТ* **40**, 375 (2014) [*Low Temp. Phys.* **40**, 286 (2014)].
6. А.А. Кордюк and S.V. Borisenko, *ФНТ* **32**, 401 (2006) [*Low Temp. Phys.* **32**, 298 (2006)].
7. А.А. Кордюк, V.B. Zabolotnyy, D.V. Evtushinsky, D.S. Inosov, T.K. Kim, B. Büchner, and S.V. Borisenko, *Eur. Phys. J. Special Topics* **188**, 153 (2010).
8. А.А. Кордюк, V.B. Zabolotnyy, D.V. Evtushinsky, T.K. Kim, B. Büchner, I.V. Plyushchay, H. Berger, and S.V. Borisenko, *Phys. Rev. B* **85**, 075414 (2012).
9. А.А. Кордюк, S.V. Borisenko, A. Koitzsch, J. Fink, M. Knupfer, and H. Berger, *Phys. Rev. B* **71**, 214513 (2005).
10. T. Valla, A.V. Fedorov, P.D. Johnson, B.O. Wells, S.L. Hulbert, Q. Li, G.D. Gu, and N. Koshizuka, *Science* **285**, 2110 (1999).
11. D.V. Evtushinsky, А.А. Кордюк, S.V. Borisenko, V.B. Zabolotnyy, M. Knupfer, J. Fink, B. Buchner, A.V. Pan, A. Erb, C.T. Lin, and H. Berger, *Phys. Rev. B* **74**, 172509 (2006).
12. А.А. Кордюк, T.K. Kim, V.B. Zabolotnyy, D.V. Evtushinsky, M. Bauch, C. Hess, B. Büchner, H. Berger, and S.V. Borisenko, *Phys. Rev. B* **83**, 081303 (2011).
13. S.V. Borisenko, V.B. Zabolotnyy, А.А. Кордюк, D.V. Evtushinsky, T.K. Kim, E. Carleschi, B.P. Doyle, R. Fittipaldi, M. Cuoco, A. Vecchione, and H. Berger, *J. Vis. Exp.* **68**, e50129 (2012).
14. R.C. Hatch, M. Bianchi, D. Guan, S. Bao, J. Mi, B.B. Iversen, L. Nilsson, L. Hornekær, and P. Hofmann, *Phys. Rev. B* **83**, 241303 (2011).
15. M.S. Bahramy, P. King, A. de la Torre, J. Chang, M. Shi, L. Patthey, G. Balakrishnan, P. Hofmann, R. Arita, N. Nagaosa, and F. Baumberger, *Nat. Commun.* **3**, 1159 (2012).

Механізми розсіяння поверхневих електронів
в топологічних ізоляторах

Ю.В. Топоров, О.А. Кордюк

Особливістю топологічних ізоляторів є наявність електронних топологічно захищених квазічастинкових поверхневих станів, винятково стійких до наявності домішок, однак структуру спектра розсіяння поверхневих квазічастинок вивчено слабо. Мета роботи — визначення структури власної енергії поверхневих станів з аналізу фотоемісійних спектрів. Зокрема, детально досліджено уширення цих станів в залежності від енергії зв'язку у Bi_2Se_3 та $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$ — найбільш досліджених топологічних ізоляторах. Виявлена сходинкова структура уширення дозволила виділити внески пружного та непружного міжзонного розсіяння (поверхня–об'єм) до квазічастинкової власної енергії та показати, що воно порівнянне з пружним внутрішньозонним розсіянням.

Ключові слова: топологічний ізолятор, ARPES спектр, розсіяння електронів.

Scattering mechanisms of surface electrons
in topological insulators

Yu.V. Toporov and O.A. Kordyuk

The uniqueness of topological insulators is in the presence of the topologically protected quasiparticle surface states, which are exceptionally resistant to presence of impurities, nevertheless the structure of the scattering spectrum of topological quasiparticles is not well studied. The aim of the work — determination of the surface states self-energy from photoemission spectra analysis. In particular, the binding energy dependence of the broadening of these states has been studied in detail in Bi_2Se_3 and $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$ — the most explored topological insulators. The revealed stair-structure of the broadening made it possible to distinguish the contributions of the elastic and inelastic interband scattering (surface to bulk) to quasiparticle self-energy and to show that these contributions are comparable with the elastic intraband scattering.

Keywords: topological insulator, ARPES spectrum, electron scattering.