

# Электронные свойства топологического изолятора $Sb_2Te_2Se$

© Ю.Е. Коваленко<sup>1</sup>, М.В. Якушев<sup>1,2,3</sup>, В.И. Гребенников<sup>1</sup>, М. Орлита<sup>4</sup>, С.Г. Титова<sup>5</sup>,  
К.А. Кох<sup>6,7,8</sup>, О.Е. Терещенко<sup>8,9</sup>, Т.В. Кузнецова<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup> Институт физики металлов им. М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук,  
620108 Екатеринбург, Россия

<sup>2</sup> Институт химии твердого тела Уральского отделения Российской академии наук,  
620990 Екатеринбург, Россия

<sup>3</sup> Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина,  
620002 Екатеринбург, Россия

<sup>4</sup> Национальная лаборатория сильных магнитных полей (LNCMI),  
38042 Cedex 9 Гренобль, Франция

<sup>5</sup> Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук,  
620016 Екатеринбург, Россия

<sup>6</sup> Институт геологии и минералогии им. В.С. Соболева  
Сибирского отделения Российской академии наук,  
630090 Новосибирск, Россия

<sup>7</sup> Кемеровский государственный университет,  
650000 Кемерово, Россия

<sup>8</sup> Новосибирский государственный университет,  
630090 Новосибирск, Россия

<sup>9</sup> Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова  
Сибирского отделения Российской академии наук,  
630090 Новосибирск, Россия

E-mail: yulya.khatchenko@mail.ru

Поступила в Редакцию 15 апреля 2024 г.

В окончательной редакции 20 июня 2024 г.

Принята к публикации 20 июня 2024 г.

Структурные и электронные свойства тонких слоев монокристаллов топологического изолятора  $Sb_2Te_2Se$  исследовались методами рентгеновской дифракции и магнитооптической спектроскопии. В спектрах пропускания, измеренных при 4.2 К, обнаружен резкий край полосы поглощения, а также осцилляции Фабри-Перо, позволившие оценить ширину запрещенной зоны  $E_g \approx 374$  мэВ и коэффициент преломления  $n \approx 8.5$ . Приложение магнитного поля с напряженностью до 11 Тл привело к существенному уменьшению амплитуды осцилляций, что было связано с эффектом Фарадея. Оценена постоянная Верде  $V \approx 10^3$  град/см · Тл.

**Ключевые слова:** топологический изолятор,  $Sb_2Te_2Se$ , магнитооптика, спектр пропускания.

DOI: 10.61011/FTP.2024.04.58543.6332H

## 1. Введение

Топологические изоляторы — это новый класс квантовых материалов, активно изучаемый в последние годы. Эти материалы являются изоляторами в объеме, но имеют топологически защищенные спин-поляризованные проводящие состояния на поверхности [1] с дисперсионными соотношениями в виде конуса Дирака, что открывает для таких материалов большие перспективы применения в спинтронике [2] и квантовой электронике [3].

Большинство недавних исследований топологических изоляторов связано с их нетривиальными свойствами. Однако их объемные электронные свойства могут также быть весьма необычными [4,5]. Интерес к объемным свойствам этих материалов обусловлен также их высокими эксплуатационными характеристиками в термоэлектрических устройствах.

В данной работе структурные и электронные свойства монокристаллов топологического изолятора  $Sb_2Te_2Se$ , выращенного вертикальным методом Бриджмена, исследовались

методами рентгеновской дифракции и магнитооптической спектроскопии.

## 2. Объекты и методика эксперимента

Монокристаллические образцы  $Sb_2Te_2Se$  были выращены вертикальным методом Бриджмена [6]. Фазовая чистота и кристаллическая структура выращенного материала исследовалась методом рентгеновской дифракции (XRD) при комнатной температуре на дифрактометре Shimadzu XRD-7000 Maxima ( $CuK_\alpha$ -излучение, графитовый монохроматор, диапазон  $2\theta$  от 5 до  $95^\circ$  с шагом  $0.02^\circ$  и временем счета 12 с на шаг).

Спектры пропускания в энергетическом диапазоне от 0.2 до 0.5 эВ при 4.2 К получены с использованием спектрометра Bruker IFS 66v/S FTIR с глобаром в качестве источника света и кремниевым болометром в качестве детектора в Национальной лаборатории сильных магнитных полей (LNCMI, Гренобль, Франция). Пленки толщиной  $\sim 10$  мкм отслаивались от монокристаллического

образца перпендикулярно оси  $c$  и затем помещались на медную фольгу с вырезанными в центре отверстиями размером около  $1 \times 1$  мм. Спектры магнито-пропускания измерялись на сверхпроводящем магните до 11 Тл в конфигурации Фарадея со светом, распространяющимся вдоль оси  $c$ .

### 3. Экспериментальные результаты и обсуждение

#### 3.1. Рентгеновская дифракция

Для аттестации кристаллической структуры методом Ритвелда использовался программный пакет GSAS-II [7]. Порошковые дифрактограммы, представленные на рис. 1, показали, что материал не содержит вторичных фаз, кристаллическая структура соответствует известным данным [8]: пространственная группа  $R\bar{3}m$ , параметры элементарной ячейки  $a = 4.1848(3) \text{ \AA}$ ,  $c = 29.9094(8) \text{ \AA}$ , координаты атомов: Sb ( $3m, 000.3931$ ), Te ( $3m, 000.7860$ ), Se ( $3m, 000$ ). Высокий немонотонный фон на рис. 1 обусловлен стеклянной подложкой и малым количеством образца. Эти причины также приводят к относительно высокому фактору расходимости  $\omega R_p = 3.34\%$ , степень соответствия  $\chi^2 = 2.13$ .

### 4. Магнитооптические измерения

На рис. 2 представлены спектры пропускания в отсутствие магнитного поля и в магнитном поле 11 Тл. Наблюдается резкий край полосы поглощения, позволяющий оценить ширину запрещенной зоны  $E_g \approx 374$  мэВ. Также наблюдаются значительные осцилляции Фабри-Перо, указывающие на малую толщину образца и высокую степень параллельности его верхней и нижней поверхности. Видно, что применение магнитного поля оказывает значительное влияние на осцилляции Фабри-Перо.

Чтобы количественно оценить изменения, вызываемые магнитным полем, выделим осциллирующую часть путем вычитания монотонной составляющей  $I_{sm}$  и нормировки на нее:  $I_{FP} = (I - I_{sm})/I_{sm}$ . На рис. 3 показан результирующий спектр осцилляций  $I_{FP}$  в диапазоне от 310 до 364 мэВ при разных значениях магнитного поля.

Видно, что магнитное поле существенно ослабляет интенсивность осцилляций Фабри-Перо. Вблизи края полосы поглощения ослабление становится больше. Мы связываем это ослабление с фарадеевским вращением плоскости поляризации света, распространяющегося через образец. Несмотря на то что в эксперименте использовался неполяризованный свет, фарадеевское вращение влияет на интенсивность пропускания за счет самоинтерференции: прошедшие волны складываются со своими отражениями от верхней и нижней границ образца. Отраженные волны отличаются от напрямую

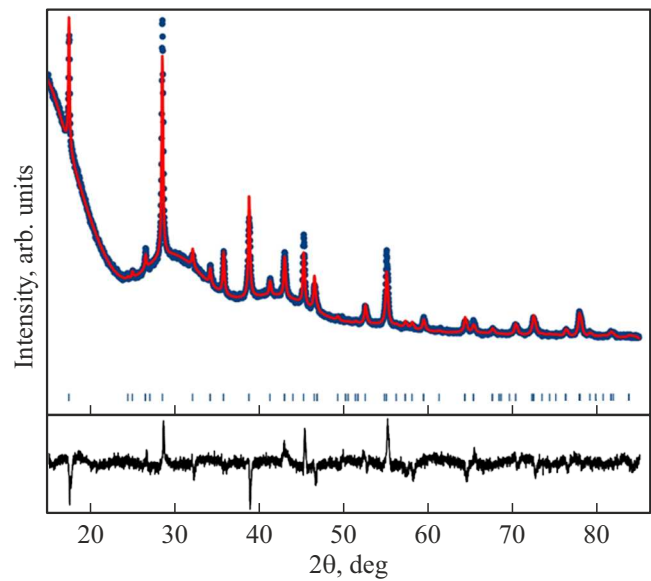


Рис. 1. Экспериментальная (кружки) и расчетная (красная линия) дифрактограммы, а также разность между ними (черная линия внизу). Брэгговские максимумы показаны вертикальными штрихами. (Цветной вариант рисунка представлен в электронной версии статьи).

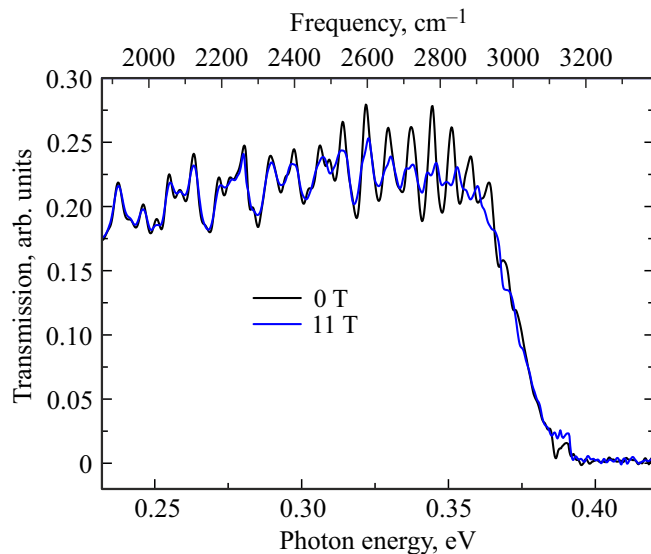


Рис. 2. Спектры пропускания, измеренные в магнитном поле 0 и 11 Тл.

прошедших волн фазами, а также углами поворота векторов поляризации.

Волну, распространяющуюся через образец толщиной  $d$ , опишем как  $\Phi = e^{ikd}$ , где ее комплексный волновой вектор  $k = k' + ik'' = n\omega/c$  определяется комплексным коэффициентом преломления  $n$ , частотой света  $\omega$  и скоростью света в вакууме  $c$ . Действительная часть  $k'$  описывает изменение фазы волны, мнимая часть  $k''$  описывает изменение амплитуды волны. После прохождения образца толщиной  $d$  коэффициент пропускания

света  $T_{\pm}$  с правой (+) и левой (-) круговой поляризацией можно описать как

$$T_{\pm} = \frac{(1 - R^2)e^{i(k \pm b)d}}{1 - R^2e^{i2(k \pm b)d}}, \quad (1)$$

где  $R = |R|e^{i\varphi}$  — коэффициент отражения от границ поверхностей,  $\varphi$  — сдвиг фазы отраженной волны относительно падающей,  $b$  — угол поворота вектора поляризации на единицу толщины образца. Угол поворота вектора поляризации  $\psi$  после прохождения образца толщиной  $d$  подчиняется закону Фарадея [9] и пропорционален магнитному полю  $B$ :  $\psi = bd = V B d$ , где  $V$  — постоянная Верде. Знаменатель получается как сумма прямой волны (амплитуда которой принимается за единицу) и волны после двойного отражения от двух границ.

Интенсивность пропускания линейно поляризованного света можно рассчитать как половину суммы квадратов модулей коэффициентов пропускания для света с правой и левой круговой поляризацией:

$$I = \frac{|T_+|^2 + |T_-|^2}{2} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma=\pm 1} \frac{|(1-R^2)|^2 e^{-2k''d}}{1 + |R^2 e^{-2k''d}|^2 - 2|R^2 e^{-2k''d}| \cos[2((k' + \sigma b)d + \varphi)]}, \quad (2)$$

где  $\sigma = \pm 1$  для света с правой (+) и левой (-) круговой поляризацией.

В первом приближении интенсивность пропускания можно записать как

$$I \approx (1 - 2\text{Re}(R^2))e^{-2k''d} \times (1 + 2|R^2 e^{-2k''d}| \cos(2bd) \cos[2(k'd + \varphi)]). \quad (3)$$

Пусть  $e^{-2k''d}$  будет константой  $\eta$ , тогда монотонную и осциллирующую части в ограниченном диапазоне  $k$  можно записать как

$$\langle I \rangle \approx (1 - 2\text{Re}(R^2))\eta, \quad (4)$$

$$I_{FP} \approx \frac{I - \langle I \rangle}{\langle I \rangle} = 2|R|^2 \eta \cos(2bd) \cos[2(k'd + \varphi)]. \quad (5)$$

Из формулы (5) видно, что при применении магнитного поля амплитуда осцилляций должна убывать по закону:

$$A_B = A_0 \cos(2VBd), \quad (6)$$

где  $A_0$  и  $A_B$  — амплитуда осцилляций при нулевом магнитном поле и в поле со значением  $B$  соответственно.

На рис. 4 представлено фурье-преобразование осцилляций Фабри-Перо, показанных на рис. 3. В спектре Фурье при 0 Тл преобладает гармоника с фурье-частотой 0.017 см, которая, согласно уравнению (5), соответствует оптической толщине  $nd = 85$  мкм. Спектр Фурье также содержит другие гармоники из-за неоднородности

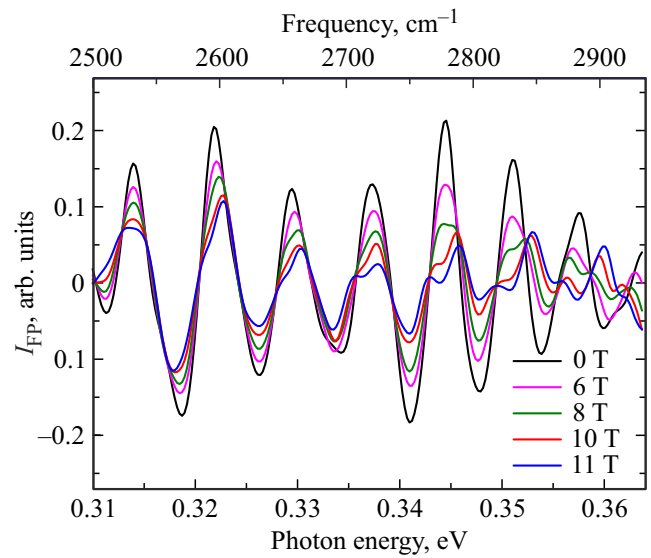


Рис. 3. Спектр осцилляций Фабри-Перо при разных магнитных полях.

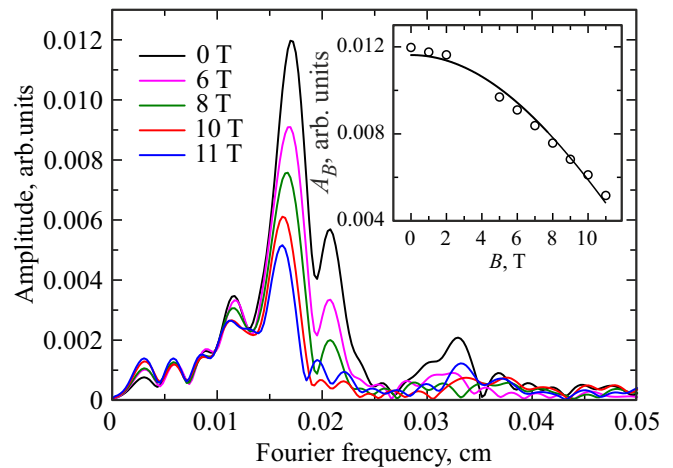


Рис. 4. Фурье-преобразование осцилляций Фабри-Перо при разных магнитных полях. На вставке показана зависимость амплитуды доминирующей гармоники от магнитного поля (кружки) и ее аппроксимация функцией (6) (сплошная линия).

образца по толщине  $d$ . При толщине образца 10 мкм получаем оценку показателя преломления  $n \approx 8.5$ . Полученное значение близко к  $n \approx 6$  для  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  [5].

На вставке к рис. 4 показана зависимость амплитуды доминирующей гармоники от магнитного поля и ее аппроксимация функцией (6). Аппроксимация позволяет оценить постоянную Верде  $V \approx 10^3$  град/см · Тл, значение которой согласуется с полученным для  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  [5].

## 5. Заключение

Исследованы структурные и электронные свойства тонких слоев монокристаллов топологического изолятора  $\text{Sb}_2\text{Te}_2\text{Se}$  с помощью рентгеноструктурного анализа и магнитооптического пропускания.

Высокое структурное качество решетки с пространственной группой  $R\bar{3}m$  и параметрами элементарной ячейки  $a = 4.1848(3) \text{ \AA}$ ,  $c = 29.9094(8) \text{ \AA}$  подтверждено методом рентгеновской дифракции.

В спектрах пропускания в инфракрасной области при 4.2 К виден край полосы поглощения, позволяющий оценить ширину запрещенной зоны  $E_g \approx 374 \text{ мэВ}$ , а также осцилляции Фабри-Перо, используемые для оценки показателя преломления  $n \approx 8.5$ .

Применение магнитных полей ослабляет амплитуду осцилляций Фабри-Перо. Предполагается, что это обусловлено фарадеевским вращением плоскости поляризации света при прохождении образца в магнитном поле. Оценено среднее значение постоянной Верде  $V \approx 10^3 \text{ град/см} \cdot \text{Тл}$  в диапазоне от 310 до 364 мэВ.

### Финансирование работы

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства образования и науки России по теме „Спин“ № 122021000036-3. Ю.Е. Коваленко благодарит Институт физики металлов им. М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук (ИФМ УрО РАН) за поддержку ее работы по государственному заданию Министерства образования и науки России по теме „Спин“, которая выполнялась в рамках молодежного проекта ИФМ УрО РАН № 32-23/мол. Рентгеновская дифракция выполнена в рамках государственного задания Министерства образования и науки России № 122013100200-2.

### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

### Список литературы

- [1] M.Z. Hasan, C.L. Kane. *Rev. Mod. Phys.*, **82**, 3045 (2010).
- [2] L. Fu, C.L. Kane. *Phys. Rev. Lett.*, **100**, 096407 (2008).
- [3] J.E. Moore. *Nature*, **464**, 194 (2010).
- [4] M. Orlita, B.A. Piot, G. Martinez, N.K. Sampath Kumar, C. Faugeras, M. Potemski, C. Michel, E.M. Hankiewicz, T. Brauner, Č. Drašr, S. Schreyeck, S. Grauer, K. Brunner, C. Gould, C. Brüne, L.W. Molenkamp. *Phys. Rev. Lett.*, **114**, 186401 (2015).
- [5] L. Ohnouteck, M. Haki, M. Veis, B.A. Piot, C. Faugeras, G. Martinez, M.V. Yakushev, C. Drasar, A. Materna, G. Strzelecka, A. Hruban, M. Potemski, M. Orlita. *Sci. Rep.*, **6**, 19087 (2016).
- [6] O.E. Tereshchenko, K.A. Kokh, V.V. Atuchin, K.N. Romanyuk, S.V. Makarenko, V.A. Golyashov, A.S. Kozhukhov, I.P. Prosvirin, A.A. Shklyayev. *JETP Lett.*, **94**, 465 (2011).
- [7] B.H. Toby, R.B. Von Dreele. *J. Appl. Cryst.*, **46**, 544 (2013).
- [8] T.L. Anderson, H.B. Krause. *Acta Cryst.*, **B30**, 1307 (1974).
- [9] H.S. Bennett, E.A. Stern. *Phys. Rev.*, **137**, A448 (1965).

Редактор Г.А. Оганесян

## Electronic properties of the topological insulator $\text{Sb}_2\text{Te}_2\text{Se}$

Yu.E. Kovalenko<sup>1</sup>, M.V. Yakushev<sup>1,2,3</sup>,  
V.I. Grebennikov<sup>1</sup>, M. Orlita<sup>4</sup>, S.G. Titova<sup>5</sup>,  
K.A. Kokh<sup>6,7,8</sup>, O.E. Tereshchenko<sup>8,9</sup>,  
T.V. Kuznetsova<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup> Miheev Institute of Metal Physics of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, 620108 Ekaterinburg, Russia

<sup>2</sup> Institute of Solid-State Chemistry of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, 620990 Ekaterinburg, Russia

<sup>3</sup> Ural Federal University, 620002 Ekaterinburg, Russia

<sup>4</sup> National Laboratory for Intense Magnetic Fields (LNCMI), 38042 Grenoble Cedex 9, France

<sup>5</sup> Institute of Metallurgy of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, 620016 Ekaterinburg, Russia

<sup>6</sup> Sobolev Institute of Geology and Mineralogy of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, 630090 Novosibirsk, Russia

<sup>7</sup> Kemerovo State University, 650000 Kemerovo, Russia

<sup>8</sup> Novosibirsk State University, 630090 Novosibirsk, Russia

<sup>9</sup> Rzhanov Institute of Semiconductor Physics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, 630090 Novosibirsk, Russia

**Abstract** The structural and electronic properties of thin layers of single crystals of the topological insulator  $\text{Sb}_2\text{Te}_2\text{Se}$  were studied by X-ray diffraction and magneto-optical spectroscopy. A sharp edge of the absorption band and Fabry-Perot oscillations were revealed in the transmission spectra measured at 4.2 K which made it possible to estimate the band gap as 374 meV and the refractive index 8.5. The application of magnetic fields up to 11 T led to a significant decrease in the amplitude of the oscillations attributed to the Faraday effect with the Verdet constant of  $10^3 \text{ degrees/cm} \cdot \text{T}$ .