

Особенности электронного спектра и оптического поглощения ультратонких пленок Bi_2Se_3

В. В. Тугушев⁺¹⁾, Э. Т. Кулатов^{*×}, К. М. Голант⁺

⁺Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, 125009 Москва, Россия

^{*}Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, 119991 Москва, Россия

[×]Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 28 августа 2017 г.

После переработки 30 августа 2017 г.

Методом функционала плотности проведен расчет электронных спектров и диэлектрической проницаемости ультратонких (1–3 QL) пленок топологического изолятора Bi_2Se_3 . Выявлена характерная особенность рассчитанных спектров: ниже уровня Ферми в диапазоне 0.0...–0.9 эВ расположены две двукратно вырожденные валентные зоны (“U-bands”), геометрически конгруэнтные низколежащим ветвям спектра в зоне проводимости. Показано, что в рассмотренных пленках насыщение оптического поглощения в ближней инфракрасной области спектра может приводить к серьезной перестройке электронной структуры и свойств. В частности, полупроводниковый (в отсутствие взаимодействия со светом) тип проводимости пленки может смениться на сильно нелинейный по интенсивности света металлический тип проводимости.

DOI: 10.7868/S0370274X1719002X

Введение. Узкощелевые полупроводники типа Bi_2Se_3 , имеющие кристаллическую структуру тетрадимита, в последние годы привлекают все большее внимание теоретиков и экспериментаторов в области физики твердого тела. Интерес к данным материалам обусловлен их принадлежностью к группе так называемых трехмерных (3D) топологических изоляторов (ТИ) [1–4]. Ряд свойств обсуждаемых материалов представляет фундаментальный интерес и обусловлен наличием вблизи поверхности объемных кристаллов 3D-ТИ электронных “топологических” состояний (ТС), особенности которых обусловлены сильным спин-орбитальным взаимодействием и инверсией электронного спектра вблизи некоторых точек объемной зоны Бриллюэна [5–7]. Указанные ТС обладают металлическим квази-дираковским спектром, лежащим внутри объемной запрещенной зоны 3D-ТИ (в обсуждаемых материалах ее ширина составляет порядка или меньше 0.2–0.3 эВ). Топологические состояния также характеризуются сильной связью спина с квазиимпульсом носителей заряда и особой (“топологической”) устойчивостью к рассеянию на немагнитных дефектах, хотя эти ТС вполне обычным образом рассеиваются на магнитных дефектах. Топологические состояния наблюдались в

экспериментах по сканирующей туннельной спектроскопии и электронному транспорту [8–10] и могут вносить заметный вклад в транспортные и магнитные свойства 3D-ТИ, хотя выделение такого вклада зачастую является непростой задачей.

До недавнего времени исследованию оптических свойств 3D-ТИ типа Bi_2Se_3 уделялось намного меньше внимания, чем их транспортным и магнитотранспортным свойствам. В первую очередь исследовалась роль ТС в поглощении света в средней и дальней ИК-областях [11–14]. Меньшее внимание привлекала спектральная область гораздо более интенсивного (в 6–8 раз) поглощения света (от ближнего ИК до ближнего УФ), которая занимает в этих материалах интервал энергий приблизительно от 1.0 до 4.0 эВ, с максимумом вблизи 2.0 эВ. В [11–14] продемонстрировано, что в области энергий 1.24–0.62 эВ (длины волн 1.0–2.0 мкм) 3D-ТИ типа Bi_2Se_3 эффективно работают в качестве широкополосных насыщающихся поглотителей света при использовании в устройствах синхронизации мод и модуляции добротности лазеров. Физический механизм насыщения поглощения в широкой полосе энергий остался, однако, неясным: в частности, роль ТС в этом насыщении вызывает большие дискуссии [11–14]. Очевидно, что вклад ТС в оптические свойства 3D-ТИ типа Bi_2Se_3 может, прежде всего, проявляться в дальнем и сред-

¹⁾e-mail: tuvictor@mail.ru

нем ИК-диапазонах [15], хотя явно идентифицировать этот вклад на фоне вклада объемных состояний весьма непросто. В ближнем ИК-диапазоне нет явных причин ожидать проявлений специфических свойств ТС (см., однако, теоретические предсказания особенностей спектра “незанятых” ТС [16–18] и поверхностных плазмонов [19] в Bi_2Se_3).

Тонкие пленки 3D-ТИ типа Bi_2Se_3 характеризуются яркими проявлениями квантовых явлений в транспортных и магнитотранспортных свойствах [1] (квантовый спиновый эффект Холла, квантовый магнитоэлектрический эффект, квантовый аномальный эффект Холла). В “топологическом” контексте масштабом толщины пленки 3D-ТИ типа Bi_2Se_3 принято считать характерную толщину, при которой начинает проявляться гибридизация ТС с противоположных границ пленки. Такая гибридизация приводит к появлению щели в спектре ТС и полупроводниковому характеру спектра. Глубина проникновения ТС от поверхности в объем пленки Bi_2Se_3 с каждой стороны обычно составляет в обсуждаемых системах порядка 1.5–2 нм, так что при толщине пленки менее, условно говоря, 20 нм ее уже можно считать “топологически” тонкой. При этом в других смыслах (например, с точки зрения магнитных или транспортных свойств) критерии толщины пленки могут быть иными. Физика “топологически” тонких пленок 3D-ТИ выделилась в последние годы в самостоятельную область исследований, поскольку данные пленки представляют большой практический интерес в качестве элементов наноструктур в комбинации с “топологически” нормальными материалами (см., например, обсуждение в [20]). Специальные исследования оптических свойств “топологически” тонких пленок 3D-ТИ и, в частности, зависимости спектров их оптического поглощения в ближнем ИК-диапазоне от толщины пленки, обсуждались недавно в [11, 12]. Данные исследования, на наш взгляд, не выявили решающих доказательств какой-то особой роли ТС в насыщении поглощения света по сравнению с нормальными (не “топологическими”) электронными состояниями.

С уменьшением толщины 3D-ТИ пленки вследствие эффекта размерного квантования радикально меняются ее электронный спектр и волновые функции, так что сохранение “топологического” состояния системы вовсе не гарантировано. Более того, разделение электронных состояний в ультратонких (толщиной менее 10 нм) пленках обсуждаемого типа на объемные и поверхностные вообще теряет смысл, а исходный (объемный) узкощелевой полупроводник 3D-ТИ вовсе не становится двумерным (2D) ТИ.

В обсуждаемой нами ситуации целенаправленное получение более-менее однородных ультратонких пленок типа Bi_2Se_3 стандартными методами осаждения на диэлектрическую подложку (например, ионной имплантацией, плазменным напылением или молекулярно-лучевой эпитаксией) технологически затруднительно, так как подложка может радикально изменить структуру и свойства таких пленок из-за контактных явлений на интерфейсе.

В литературе, однако, описаны и иные технологические методы получения ультратонких пленок 3D-ТИ типа Bi_2Se_3 на диэлектрических подложках. Эти методы основаны на эффекте отслаивания нанометровых по толщине “чешуек” 3D-ТИ при растворении объемного материала в некоторых жидкостях, механическом воздействии на него или в процессе химических реакций в жидкой фазе с синтезом 3D-ТИ в качестве конечного продукта [21]. Получающаяся в итоге технологического процесса коллоидная система, содержащая “чешуйки” 3D-ТИ, осаждается на диэлектрическую подложку, после чего жидкость удаляется тем или иным способом, а “чешуйки” прилипают к подложке в результате адгезии. Одним из подобных методов в [21] удалось достичь толщины 3–7 нм для высококачественных пленок Bi_2Se_3 на подложке кварца, что, по-видимому, является на сегодняшний день технологическим рекордом. При этом продемонстрирован значительный эффект насыщения поглощения света в ближнем ИК-диапазоне.

Таким образом, явление насыщения оптического поглощения в ближнем ИК-диапазоне имеет место в пленках 3D-ТИ типа Bi_2Se_3 различной толщины, хотя роль именно ТС в этом явлении остается непонятной. Наша работа не претендует на глобальное решение данной проблемы. Однако, мы хотим показать, что в ультратонких пленках Bi_2Se_3 , насыщение поглощения может приводить к серьезной перестройке электронного спектра и свойств системы, что связано с особенностями ее электронной структуры, ранее не привлекавшими внимания исследователей.

Электронный спектр ультратонких пленок Bi_2Se_3 . Численные расчеты электронных и оптических свойств ультратонких пленок Bi_2Se_3 были выполнены в рамках теории функционала электронной плотности (DFT) полнопотенциальным линейаризованным методом присоединенных плоских волн (WIEN2k) [22]. Обменно-корреляционные эффекты учитывались с помощью обобщенного градиентного приближения (GGA) [23] при оптимизации структур, а также с помощью модифицированного функционала Becke–Johnson (mBJ) [24] при расчете электронных и оптических свойств, который позволяет уве-

личить энергетическую щель в спектре, недооцениваемую GGA-аппроксимацией.

Вычисления электронной структуры проводились в суперячейках с одним, двумя и тремя пятислойниками (1QL, 2QL и 3QL), изолированных вакуумом для предотвращения взаимодействий между $n\text{QL}$ ($n = 1, 2, 3$) с их репликами вдоль z -оси. В xy -плоскости сохранена трансляционная инвариантность (периодичность). Эта, так называемая, “slab geometry”-методика применяется для расчетов тонких пленок, поверхностей и молекул. Поскольку в mBJ-потенциале присутствует член $\nabla\rho/\rho$, мы использовали специальную процедуру (см. [22], User’s Guide, item 4.5.10) подавления возможных нестабильностей, связанных с вакуумом, при электронных итерациях с mBJ-потенциалом.

На рис. 1 представлены суперячейки, которые мы использовали в расчетах электронной структуры и оптических свойств ультратонких пленок Bi_2Se_3 .

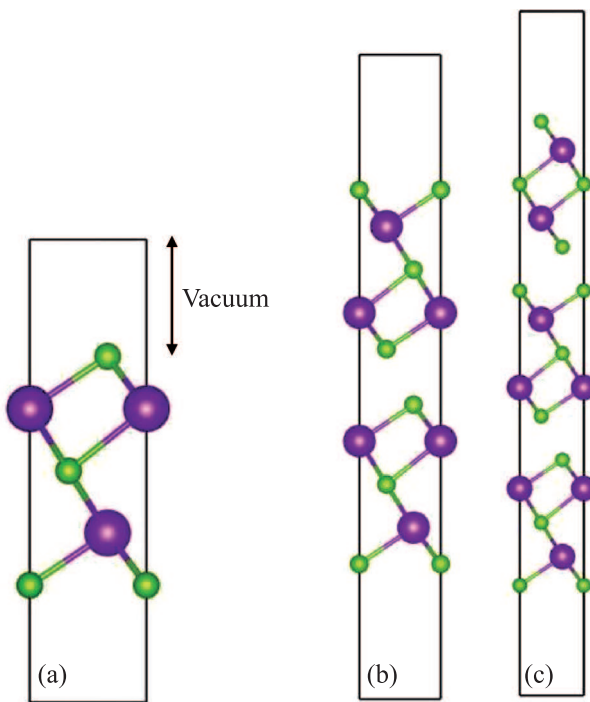


Рис. 1. (Цветной онлайн) Суперячейки 1 QL (a), 2 QL (b) и 3 QL (c) с вакуумом 7.25 Å, 12.04 Å и 12.47 Å, соответственно. Атомы Bi – крупные, фиолетовые кружки, атомы Se – мелкие, зеленые

Положения всех атомов в указанных суперячейках были оптимизированы псевдопотенциальным плосковолновым методом VASP [25], который значительно быстрее и эффективнее WIEN2k именно для ионных релаксаций. Оптимизация структуры была проведена при экспериментально определен-

ных параметрах решетки [26]. Оказалось, что в отрелаксированных структурах координаты x и y атомов практически не изменяются по сравнению со стартовыми (начальными) координатами, в то время как связи между ближайшими атомами в z -направлении становятся короче в среднем на $\sim 1.8\%$. При этом изолирующая вакуумная прокладка (“подушка безопасности”) утолщается, а щель ван дер Ваальса между пятислойниками уменьшается. Полученные VASP-релаксированные кристаллические структуры 1–3 QL Bi_2Se_3 были использованы для расчета электронных и оптических свойств релятивистским методом WIEN2k, т.е. с учетом спин-орбитального взаимодействия (COB), в формализме обменно-корреляционного mBJ-функционала.

Анализ зонных диаграмм и DOS 1–3 QL Bi_2Se_3 (рис. 2, 3) показывает, что во всех трех случаях реализуются полупроводниковые структуры с прямой щелью в точке Γ с энергией $\sim 0.9, 0.164$ и 0.094 эВ в 1–3 QL соответственно. Для сравнения приведем данные эксперимента [27]: $E_g(\Gamma) = 0.252$ и 0.138 эВ для 2 и 3 QL. В недавнем DFT расчете [28] были получены $E_g(\Gamma) = 0.13$ и 0.07 эВ для 2 и 3 QL соответственно.

Диэлектрическая проницаемость ультратонких пленок Bi_2Se_3 . В рассчитанных нами электронных спектрах пленок толщиной 1–3 QL Bi_2Se_3 (см. рис. 2, 3) присутствует интересная особенность: ниже уровня Ферми в диапазоне $0.0 \dots -0.9$ эВ расположены две двукратно вырожденные валентные зоны (“U-bands”), геометрически конгруэнтные (параллельные в двумерном \mathbf{k} -пространстве) низколежащим ветвям в зоне проводимости. Эти “U-bands” сформированы атомами Se, находящимися на обеих поверхностях пленки, и вносят большой вклад в полную волновую функцию. На графике DOS для 3 QL Bi_2Se_3 (см. рис. 3b) мы находим дополнительное подтверждение этому заключению. Чисто качественное рассмотрение зонных диаграмм показывает, что именно “U-bands” с большим весом должны вносить основной вклад в оптические переходы.

Для проверки этого предположения мы выполнили расчеты функции диэлектрической проницаемости (ДП) $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$ в формализме линейного отклика Кубо. Метод расчета оптических свойств кристаллов подробно описан в нашей статье [29]. Зонные энергии и электронные волновые функции рассчитывались с включением эффектов COB, а интегрирование в \mathbf{k} -пространстве выполнялось методом тетраэдров по $(420 \cdot \mathbf{k})$ -точкам в неприводимой части зоны Бриллюэна. На рис. 4, 5 представлены результаты расчетов действительной и мнимой ча-

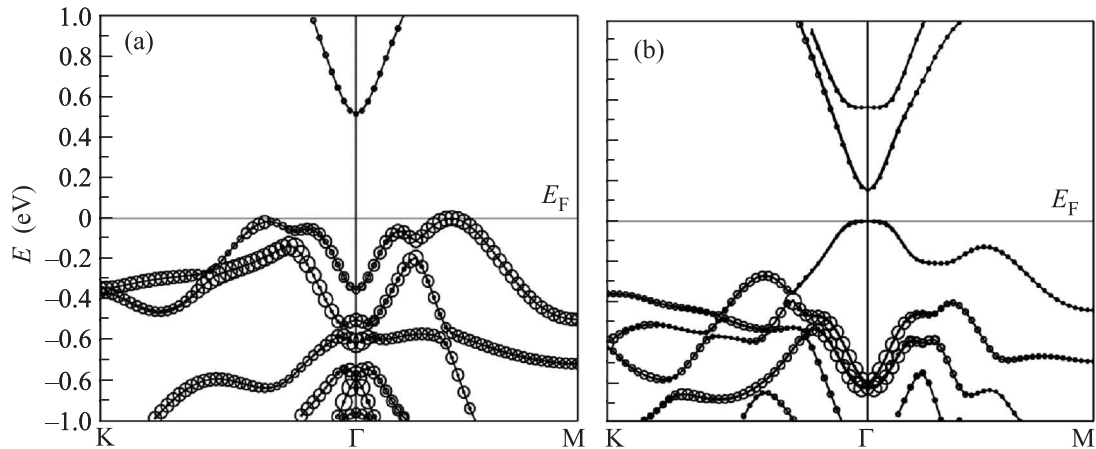


Рис. 2. Зонные диаграммы 1 QL Bi_2Se_3 (a) и 2 QL Bi_2Se_3 (b) в окрестности уровня Ферми. Кружочки на дисперсионных кривых и их размер характеризуют вклад атомов Se на поверхности пленки, пропорциональный $(s + p + d)$ -состояниям

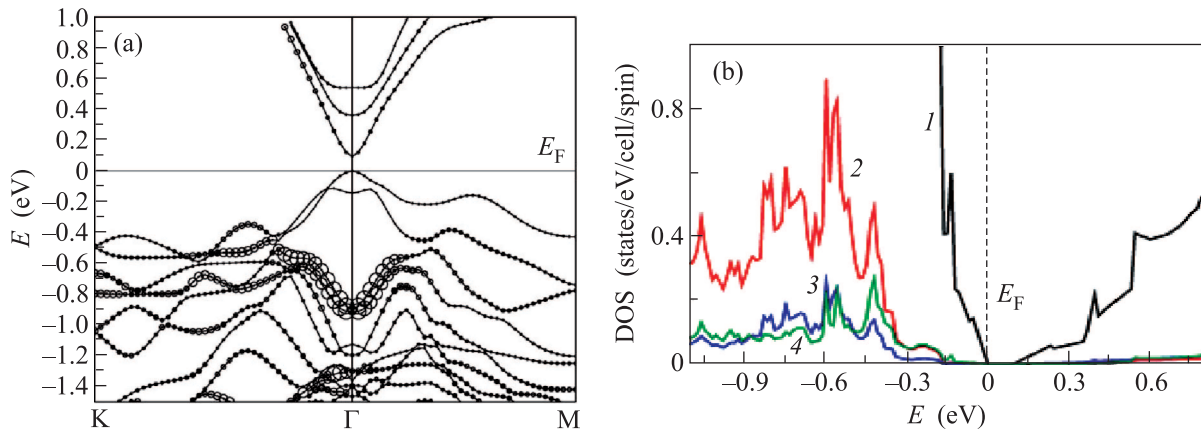


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зонная диаграмма (a) и плотность электронных состояний (DOS) (b) 3 QL Bi_2Se_3 в окрестности уровня Ферми. Смысл кружков на зонной диаграмме тот же, что и на рис. 2a. На графике DOS кривая 1 (черная) – полная DOS, кривая 2 (красная) – $(s + p + d)$ -DOS атомов Se на поверхности пленки, кривые 3 и 4 (зеленая и синяя) – $(s + p + d)$ -DOS атомов Bi внутри пятислойника

стей диэлектрической проницаемости (ДДП и МДП), сравнение с недавно опубликованными экспериментальными данными по $\epsilon(\omega)$ для 3 QL Bi_2Se_3 [22] и селективный анализ вкладов отдельных зон в общую ДП.

Из рис. 4a следует, что расчет неплохо воспроизводит эксперимент: расчетный главный пик $\epsilon_2(\omega)$ при ~ 2.2 эВ по положению и амплитуде согласуется с экспериментом, как и в целом изменение с энергией экспериментальной МДП; расчетная статическая ДДП $\epsilon(0)$ практически совпадает с экспериментальной. Заметим, что авторы работы [22] сами отмечают большую некорректность данных по $\epsilon(\omega)$ в районе энергий 1.3–1.5 эВ и 2.7–3.3 эВ. Рис. 4b иллюстрирует вклады “U-bands” в полную МДП 3 QL Bi_2Se_3 . В диапазоне $-0.6 \dots -0.9$ эВ расположены две двукратно вырожденные зоны с порядковыми номера-

ми 137–140 (“U-bands”), геометрически конгруэнтные (параллельные в двумерном \mathbf{k} -пространстве) низколежащим ветвям в зоне проводимости (зоны 145–147 на рис. 3a). Именно эти зоны вносят основной вклад в формирование главного пика $\epsilon_2(\omega)$ при 2.2 эВ.

На рис. 5 изображены действительная и мнимая части диэлектрической проницаемости 1 QL Bi_2Se_3 и 2 QL Bi_2Se_3 : в целом ДП этих систем качественно повторяет рассмотренную выше ситуацию в 3 QL Bi_2Se_3 .

Спектр квазичастиц в режиме насыщения поглощения света. Простейшее теоретическое рассмотрение модели полупроводниковой системы, взаимодействующей с сильным электромагнитным полем и находящейся в режиме насыщения поглощения света, предполагает сохранение неизменной формы электронного спектра при изменении характера за-

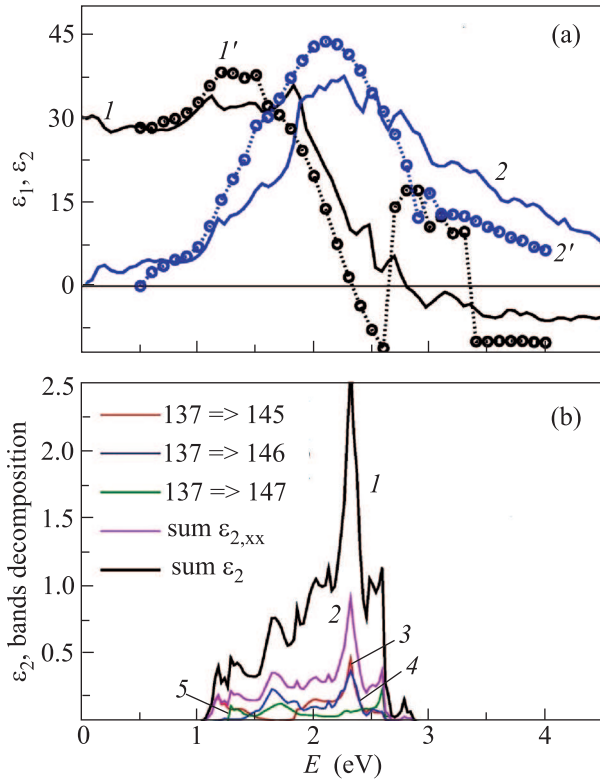


Рис. 4. (Цветной онлайн) (a) – Действительная и мнимая части диэлектрической проницаемости 3 QL Bi_2Se_3 : $\varepsilon_1(\omega)$ (черная, 1 – расчет) и $\varepsilon_2(\omega)$ (голубая, 2 – расчет), черные кружки + черный пунктир, 1' – экспериментальная $\varepsilon_1(\omega)$ [30], голубые кружки + голубой пунктир, 2' – экспериментальная $\varepsilon_2(\omega)$ [30]. (b) – Вклад зоны 137 “U-bands” и трех зон 145–147 (коричневая 3, синяя 4 и зеленая 5 линии), и их суммарные вклады в $\varepsilon_{2,xx}$ (фиолетовая 2 линия) и в общую $\varepsilon(\omega)$ (черная 1 линия) для 3 QL Bi_2Se_3

полнения ветвей спектра фото-возбужденными носителями (см, например, обзор [31]). В более сложном подходе [32] учитывается изменение зонной структуры под воздействием света, что приводит к интересным физическим эффектам, в частности, появлению дополнительных мини-щелей в электронной и дырочной ветвях спектра. Далее мы попытаемся в духе работы [32] учесть эффект изменения электронного спектра ультратонкой пленки Bi_2Se_3 , взаимодействующей с сильным классическим монохроматическим электромагнитным полем. Для этого, используя результаты численного расчета, выполненного в предыдущем разделе статьи, рассмотрим простую двузонную модель конгруэнтных участков электронного спектра пленки. В дипольном приближении и при учете только резонансного межзонного взаимодействия вблизи точки Γ зоны Бриллюэна гейзенберговский гамильтониан модели запишем в виде

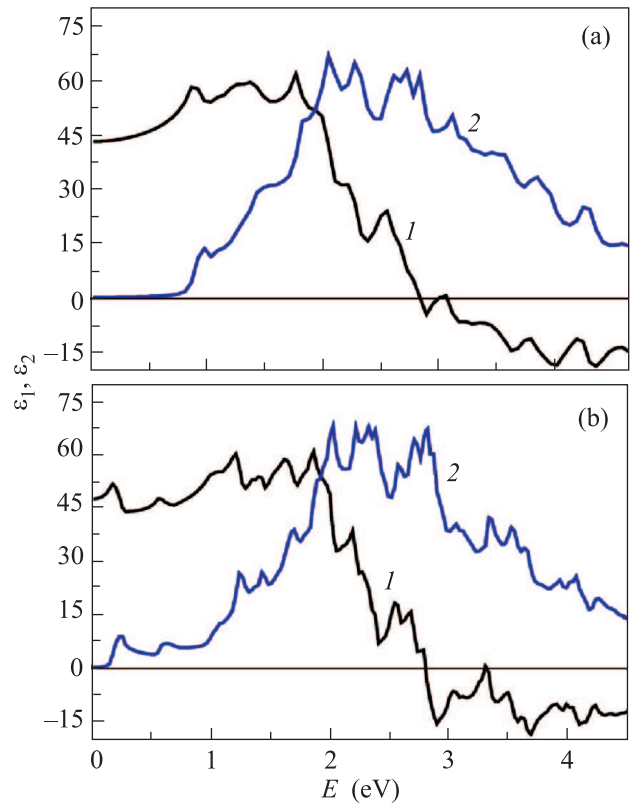


Рис. 5. (Цветной онлайн) Действительная 1 и мнимая 2 части диэлектрической проницаемости 1 QL Bi_2Se_3 (a) и 2 QL Bi_2Se_3 (b)

$$H_0(t) = \Sigma[E_c(\mathbf{k})a_{c\mathbf{k}}^+ a_{c\mathbf{k}} + E_v(\mathbf{k})a_{v\mathbf{k}}^+ a_{v\mathbf{k}} + g a_{c\mathbf{k}}^+ a_{v\mathbf{k}} e^{-i\Omega t} + g^* a_{v\mathbf{k}}^+ a_{c\mathbf{k}} e^{i\Omega t}], \quad (1)$$

где $a_{v\mathbf{k}}^+$, $a_{c\mathbf{k}}^+$ – гейзенберговские операторы рождения дырок и электронов соответственно в валентной зоне и зоне проводимости, \mathbf{k} – двумерный квазиимпульс, Ω – частота света, $E_c(\mathbf{k})$ и $E_v(\mathbf{k})$ – законы дисперсии электронной и дырочной ветвей спектра:

$$E_c(\mathbf{k}) = \frac{E_g}{2} + \eta_c(\mathbf{k}) \quad \text{и} \quad E_v(\mathbf{k}) = -\frac{E_g}{2} + \eta_v(\mathbf{k}), \quad (2)$$

обладающие в некоторой области \mathbf{k} свойством геометрической конгруэнтности при сдвиге по энергии на E_g ширины запрещенной зоны в точке Γ : $\eta_c(\mathbf{k}) \approx \eta_v(\mathbf{k}) = \eta(\mathbf{k})$.

Особенность рассматриваемого спектра состоит в том, что в точке Γ одновременно находятся минимумы зоны проводимости и валентной зоны, тогда как максимум валентной зоны лежит достаточно далеко от этой точки. Параметр взаимодействия электронов с электромагнитным полем запишем в виде $g = \mathbf{d}_{cv} \mathbf{E}_\Omega$, где \mathbf{d}_{cv} – межзонный матричный элемент дипольного момента вблизи точки Γ , \mathbf{E}_Ω – Фурье-компонента напряженности электрического поля. В

гамильтониане (1) мы пренебрегли изменением импульса электрона при межзонном переходе вблизи точки Γ под воздействием света.

Мы рассматриваем поведение системы при нулевой температуре в режиме насыщения оптического поглощения, предполагая электромагнитное поле достаточно сильным в смысле $|g| \gg \frac{1}{\tau_R}$, где τ_R – время межзонной рекомбинации. В этом режиме происходит существенная перестройка исходного энергетического спектра носителей. После преобразования с помощью оператора $U(t) = \exp\left\{-\frac{i\Omega t}{2}[\Sigma(a_{c\mathbf{k}}^+ a_{c\mathbf{k}} - a_{v\mathbf{k}}^+ a_{v\mathbf{k}})]\right\}$, исключая явную зависимость гамильтониана (1) от времени, можно перейти к эффективному гамильтониану квазичастиц:

$$H_0 = U^+ H_0(t) U - iU^+ \frac{\partial}{\partial t} U =$$

$$= \Sigma[\varepsilon_\alpha(\mathbf{k})\alpha_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}} + \varepsilon_\beta(\mathbf{k})\beta_{\mathbf{k}}^+ \beta_{\mathbf{k}} + g[\alpha_{\mathbf{k}}^+ \beta_{\mathbf{k}} + \beta_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}}], \quad (3)$$

$$\varepsilon_{\alpha,\beta}(\mathbf{k}) = \pm\Delta + \eta(\mathbf{k}), \quad \Delta = (\Omega - E_g)/2 > 0. \quad (4)$$

Здесь и далее для простоты считаем параметр g действительной величиной, $\alpha_{\mathbf{k}}^+$, $\beta_{\mathbf{k}}^+$ – операторы рождения квазичастиц, записанные в электронном представлении.

Диагонализация гамильтониана (3) осуществляется с помощью матрицы:

$$T = \begin{pmatrix} u & v \\ -v & u \end{pmatrix}, \quad (u, v) = \sqrt{1/2} \left[1 \pm \frac{\Delta}{\sqrt{[\Delta^2 + g^2]}} \right]^{1/2}. \quad (5)$$

Запишем собственные значения гамильтониана (3), которые определяют спектр квазичастиц:

$$E_{\alpha,\beta} = \pm\sqrt{[\Delta^2 + g^2]} + \eta(\mathbf{k}). \quad (6)$$

Выражение (6) имеет форму спектра двузонного металла, щель между зонами в точке Γ , $\Lambda = 2\sqrt{[\Delta^2 + g^2]}$, сильно отличается от исходного значения E_g в отсутствие электромагнитного поля. На рис. 6 качественно показан спектр квазичастиц (6), соответствующих гамильтониану (3), в координатах $E_{\alpha,\beta}$ и $\eta(\mathbf{k})$; для перехода к спектру исходных электронов и дырок, соответствующих гамильтониану (1), следует сместить ветви E_α и E_β по шкале энергий на $-\Lambda/2$ и $\Lambda/2$ соответственно. Транспортные свойства системы со спектром (6) определяются положением соответствующих квазиуровней Ферми, μ_α и μ_β , относительно краев квазичастичных подзон. Расчет положения μ_α и μ_β , требующий учета вкладов других участков исходного спектра в перераспределение электронной плотности внутри пленки под

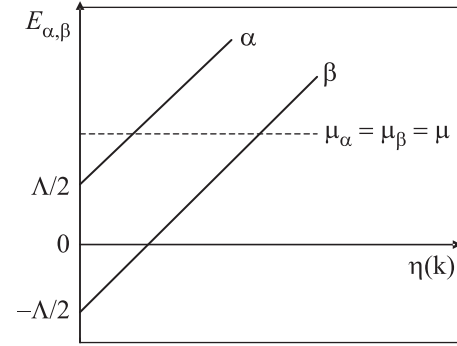


Рис. 6. Спектр квазичастиц в режиме насыщения поглощения света: $E_{\alpha,\beta} = \pm\Lambda/2 + \eta(\mathbf{k})$, где $\Lambda/2 = (\Delta^2 + g^2)^{1/2}$

воздействием электромагнитного поля, представляет сложную задачу и здесь не обсуждается. В предположении об электронейтральности пленки и при условии пренебрежения перестройкой участков ее электронного спектра вдали от точки Γ разумно просто считать положения квазиуровней Ферми совпадающими, $\mu_\alpha = \mu_\beta = \mu$ (см. обсуждение в [32]) и рассматривать, таким образом, эффективную модель равновесного двухзонного двумерного металла с различным заполнением подзон $n_{\alpha,\beta} = \rho_{\alpha,\beta}[\mu \pm \Lambda]$, где $\rho_{\alpha,\beta}$ – плотность квазичастичных состояний в соответствующих подзонах.

Гамильтониан (3) может рассматриваться как нулевое приближение при решении различных задач по расчету оптических и транспортных характеристик исследуемой системы в сильном электромагнитном поле в режиме насыщения поглощения. При этом в качестве возмущения к (3) следует добавить слагаемые, учитывающие рассеяние квазичастиц на примесях и фононах, а также процессы излучательной рекомбинации [33].

Заключение. В данной работе проведен численный расчет электронных спектров и диэлектрической проницаемости ультратонких (1–3 QL) пленок топологического изолятора Bi_2Se_3 . Выявлена интересная особенность рассчитанных спектров: ниже уровня Ферми в диапазоне 0.0...–0.9 эВ расположены две двукратно вырожденные валентные зоны (“U-bands”), геометрически конгруэнтные низколежащим ветвям спектра в зоне проводимости. Такие “U-bands” образованы в основном атомами Se, находящимися на обеих границах пленки, и вносят значительный вклад в межзонное оптическое поглощение.

Показано, что в рассмотренных пленках насыщение поглощения может приводить к серьезной перестройке электронной структуры и свойств системы

в ближней ИК области спектра из-за наличия “U-bands”. В частности, исходный (в отсутствие взаимодействия со светом) полупроводниковый тип проводимости пленки может смениться на сильно нелинейный по интенсивности света металлический тип проводимости.

В работе рассчитана электронная структура и диэлектрическая проницаемость свободных ультратонких пленок Bi_2Se_3 . Однако, в экспериментах пленки осаждаются на какую-либо диэлектрическую подложку (например, кварцевую). При этом возникает асимметрия поверхностного потенциала на границах пленка–подложка и пленка–вакуум, приводящая к обусловленному эффектами спин-орбитального взаимодействия расщеплению типа Рашбы в электронном спектре (см., например, [34]). В нашем случае это расщепление приведет к соответствующей модификации двукратно вырожденных “U-bands” в валентной зоне и изменению формы ветвей $E_{\alpha,\beta}$ в спектре (6) в меру малости энергии спин-орбитального взаимодействия по сравнению с шириной запрещенной зоны в Γ -точке зоны Бриллюэна.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект # 17-19-01057).

1. M. Z. Hasan and C. L. Kane, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 3045 (2010).
2. L. Fu and C. L. Kane, *Phys. Rev. B* **76**, 45302 (2007).
3. L. Fu, C. L. Kane, and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 106803 (2007).
4. X.-L. Qi and S.-C. Zhang, *Phys. Today*. doi:10.1063/1.3293411 (2010).
5. D. Kim, S. Cho, N. P. Butch, P. Syers, K. Kirshenbaum, S. Adam, J. Paglione, and M. S. Fuhrer, *Nat. Phys.* **8**, 459 (2012).
6. H. Zhang, C.-X. Liu, X.-L. Qi, X. Dai, Z. Fang, and S.-C. Zhang, *Nat. Phys.* **5**, 438 (2009).
7. D. Hsieh, Y. Xia, D. Qian, L. Wray, F. Meier, J. H. Dil, J. Osterwalder, L. Patthey, A. V. Fedorov, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y. S. Hor, R. J. Cava, and M. Z. Hasan, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 2 (2009).
8. Y. L. Chenet, J.-H. Chu, J. G. Analytis, Z. K. Liu, K. Igarashi, H.-H. Kuo, X. L. Qi, S. K. Mo, R. G. Moore, and D. H. Lu, *Science* **329**, 659 (2010).
9. P. Cheng, C. Song, T. Zhang et al. (Collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **105**, 76801 (2010).
10. L. A. Wray, S.-Y. Xu, Y. Xia, D. Hsieh, A. V. Fedorov, Y. S. Hor, R. J. Cava, A. Bansil, H. Lin, and M. Z. Hasan, *Nat. Phys.* **7**, 32 (2010).
11. J. Sun and D. J. Singh, *J. Appl. Phys.* **121**, 064301 (2017).
12. M. Eddrief, F. Vidal, and B. Gallas, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **49**, 505304 (2016).
13. S. Kim, D. H. Shin, J. H. Kim, C. W. Jang, J. W. Park, H. Lee, S.-H. Choi, S. H. Kim, K.-J. Yee, and N. Bansal, *Nanotechnology* **27**, 045705 (2016).
14. Y. Wang, S. Liu, J. Yuan, P. Wang, J. Chen, J. Li, S. Xiao, Q. Bao, Y. Gao, and J. He, *Scientific Reports* doi: 10.1038/srep33070 (2016).
15. S. G. Egorova, V. I. Chernichkin, L. I. Ryabova, E. P. Skipetrov, L. V. Yashina, S. N. Danilov, S. D. Ganichev, and D. R. Khokhlov, *Scientific Reports* doi: 10.1038/srep11540 (2015).
16. S. V. Eremeev, I. V. Silkin, T. V. Menshchikova, A. P. Protogenov, and E. V. Chulkov, *JETP Lett.* **96**, 780 (2012).
17. D. Niesner, Th. Fauster, S. V. Eremeev, T. V. Menshchikova, Yu. M. Koroteev, A. P. Protogenov, E. V. Chulkov, O. E. Tereshchenko, K. A. Kokh, O. Alekperov, A. Nadjafov, and N. Mamedov, *Phys. Rev. B* **86**, 205403 (2012).
18. D. Niesner, S. Otto, Th. Fauster, E. V. Chulkov, S. V. Eremeev, E. Tereshchenko, and K. A. Kokh, *J. Electron. Spectr. Rel. Phenomena* **195**, 258 (2014).
19. P. Di Pietro, M. Ortolani, O. Limaj, A. Di Gaspare, V. Giliberti, F. Giorgianni, M. Brahlek, N. Bansal, N. Koirala, S. Oh, P. Calvani, and S. Lupi, *Nature Nanotechnology* doi:10.1038/nnano.2013.134 (2013).
20. V. N. Men'shov, V. V. Tugushev, and E. V. Chulkov, *Ginzburg Centennial Conference on Physics, Lebedev Physical Institute, Moscow, May 29 – June 03, (2017)*, Book of Abstracts, p. 70.
21. Y. Xu, J. Wu, W. Fang, L. You, and L. Tong, *Optics Communications* doi.org/10.1016/j.optcom.2015.11.061i (2015).
22. P. Blaha, K. Schwarz, G. Madsen, D. Kvasnicka, and J. Luitz, *Wien2k, An Augmented Plane Wave+Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties*, Karlheinz Schwarz, Techn. Universitat Wien, Austria (2001).
23. J. P. Perdew, S. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
24. F. Tran and P. Blaha, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 226401 (2009).
25. G. Kresse and J. Furthmuller, *Phys. Rev. B* **54**, 11169 (1996).
26. *National Institute for Materials Science*, Tsukuba, Japan, NIMS Materials Database. [Electronic resource] <http://crystaldb.nims.go.jp/crystaldb>. (date of downloads 01.01.2017).
27. Y. Zhang, K. He, C. Z. Chang, C.-L. Song, L.-L. Wang, X. Chen, J.-F. Jia, Z. Fang, X. Dai, W.-Y. Shan, S.-Q. Shen, Q. Niu, X.-L. Qi, S.-C. Zhang, X.-C. Ma, and Q.-K. Xue, *Nat. Phys.* **6**, 584 (2010).
28. J. Sun and D. J. Singh, *J. Appl. Phys.* **121**, 064301 (2017).
29. Yu. A. Uspenskii, E. T. Kulatov, and S. V. Halilov, *Phys. Rev. B* **54**, 474 (1996).

30. M. Eddrief, F. Vidal, and B. Gallas, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **49**, 505304 (2016).
31. E. Garmire, *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics* **6**, 6 (2000).
32. В. М. Галицкий, С. П. Гореславский, В. Ф. Елесин, *ЖЭТФ* **57**, 207 (1969).
33. А. С. Александров, В. Ф. Елесин, В. Г. Михайлов, И. А. Полуэктов, Ю. М. Попов, *Квантовая электроника* **5**, 359 (1978).
34. G. Landolt, S. Schreyeck, S. V. Eremeev, B. Slomski, S. Muff, J. Osterwalder, E. V. Chulkov, C. Gould, G. Karczewski, K. Brunner, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, and J. H. Dil, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 057601 (2014).