

خواص ترموالکتریکی عایق توپولوژیکی در حضور ناخالصی های مغناطیسی و غیر مغناطیسی

علی رضایی، سعید عابدین پور، جهانفر ابویی

دانشکده فیزیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، صندوق پستی ۴۵۱۹۵-۱۱۵۹، زنجان، ایران

چکیده

در این مقاله به بررسی خواص ترموالکتریکی عایق توپولوژیکی در حضور ناخالصی های مغناطیسی و غیر مغناطیسی پرداخته ایم. با استفاده از رهیافت بولتزمن در تقریب زمان واهلش رسانندگی الکتریکی، رسانندگی گرمایی، ضریب سی بک و همچنین بازدهی ترموالکتریکی را در عایق های توپولوژیکی بدست آورده ایم. رفتار تمام این کمیت ها در حضور و غیاب گاف انرژی سطحی مطالعه شده است. عایق های توپولوژیکی آلابیده شده با ناخالصی مغناطیسی، بدلیل وجود پراکندگی به عقب در این مواد، رفتار متفاوتی نسبت به عایق های آلابیده شده با ناخالصی غیرمغناطیسی، از خود نشان می دهند.

عایق های توپولوژیکی سه بعدی (دو بعدی) موادی هستند که حالات سطحی (لبه ای) رسانشی و حجمی (سطحی) عایق دارند. حالت های رسانشی در این گونه مواد تا زمانی که تقارن وارونی زمان شکسته نشود حفظ می شوند [۱]. این مواد بعلت خصوصیات توپولوژیکی خود، رفتار جالب توجهی در حضور ناخالصی ها نشان می دهند. تاثیر ناخالصی ها در تغییر خصوصیات ماده به نوع ناخالصی بستگی دارد. آرایش عایق های توپولوژیکی با ناخالصی غیر مغناطیسی، منجر به ایجاد حالت های مقیدی می شود که انرژی آن ها داخل گاف حجم قرار دارد. این ناخالصی ها توانایی شکست تقارن وارونی زمان را ندارند و در نتیجه نمی توانند باعث گذار فاز توپولوژیکی و حذف حالت های سطحی رسانا شوند اما ناخالصی های مغناطیسی به دلیل داشتن مولفه اسپینی عمود بر سطح عایق، تقارن وارونی زمان را می شکنند و سبب ایجاد گاف انرژی برای حالات سطحی می شوند. همچنین به علت برهمکنش تبدلی با اسپین الکترون های رسانشی سطح عایق توپولوژیکی، اثرات متمایزی (نسبت به ناخالصی های غیر مغناطیسی) بر جای می گذارند [۲]. به عنوان مثال در مطالعه ی رسانندگی سطحی عایق های توپولوژیکی در حضور ناخالصی های مغناطیسی دیده شده است که (۱) با افزایش مولفه موازی ممان مغناطیسی ناخالصی سطحی، رسانندگی الکتریکی سطح افزایش می یابد و (۲) اگر ممان مغناطیسی ناخالصی های سطحی، به موازات سطح باشند، گاف دار شدن ساختار نواری سطحی، مقدار رسانندگی الکتریکی سطح بدون گاف را تغییر نمی دهد [۳].

در این مقاله سعی شده است خواص تراپردی گرمایی و الکتریکی سطح یک عایق توپولوژیکی در حضور ناخالصی های مغناطیسی و غیرمغناطیسی بررسی شود. با استفاده از رهیافت بولتزمن در تقریب زمان واهلش^۱، به مطالعه ی ضریب سی بک^۲ و بازده ترموالکتریکی می پردازیم. هامیلتونی سطح عایق توپولوژیکی حول نقطه دیراک با معادله دیراک داده می شود:

$$H = \hbar v_F (k \times \sigma)_z \quad (1)$$

^۱ Relaxation Time Approximation

^۲ Seebeck Coefficient

که k_x و k_y مولفه های بردار موج الکترون است، v_F سرعت فرمی و σ اسپین الکترون سطح عایق است. با اعمال میدان مغناطیسی عمود بر سطح یا با آرایش حجم عایق توپولوژیکی توسط ناخالصی مغناطیسی می توان گاف انرژی در حالت های سطحی ایجاد کرد. در اینصورت هامیلتونی دیراک و ویژه مقادیر انرژی مربوطه به شکل زیر خواهد بود:

$$H = \hbar v_F (\mathbf{k} \times \sigma)_z + \Delta \sigma_z, \quad \varepsilon_k^\pm = \pm \sqrt{\Delta^2 + \hbar^2 v_F^2 k^2} \quad (2)$$

در این رابطه Δ گاف انرژی است. در حضور ناخالصی روی سطح عایق توپولوژیکی، جمله $V(\mathbf{r}) = v_0 \delta(\mathbf{r})$ به سیستم اضافه می شود. در صورتی که ناخالصی غیر مغناطیسی باشد، v_0 اسکالر است اما در صورتی که ناخالصی مغناطیسی باشد $v_0 = J \sigma_z s_z$ است که s_z مولفه ی اسپینی ناخالصی مغناطیسی و J برهمکنش تبادل سیستم است. حضور ناخالصی مغناطیسی سبب بروز رفتارهای متفاوتی نسبت به ناخالصی غیر مغناطیسی می شود که در ادامه به آن می پردازیم. برای بدست آوردن رسانندگی الکتریکی، رسانندگی گرمایی و ضریب سی بک از نظریه ترابرد بولتزمن استفاده می کنیم. این رهیافت به ما این امکان را می دهد که مدلی برای کمیت های ماکروسکوپی مانند تحرک پذیری، ضریب پخش و رسانندگی بدست آوریم. در رهیافت بولتزمن، زمان واهلش (τ) با رابطه ی زیر داده می شود:

$$\frac{1}{\tau} = A \int \omega(\mathbf{k}, \mathbf{k}') (1 - \cos \alpha) \frac{d^2 k'}{(2\pi)^2} \quad (3)$$

که در این رابطه $\omega(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ نرخ پراکندگی از حالت با تکانه \mathbf{k}' به حالت با تکانه \mathbf{k} است که توسط قانون طلایی فرمی در تقریب اول بورن قابل محاسبه است و عامل وزن $(1 - \cos \alpha)$ سهم پراکندگی با زوایای مختلف را در رسانندگی مشخص می کند، α زاویه بین \mathbf{k} و \mathbf{k}' است.

با استفاده از زمان واهلش، چگالی جریان الکتریکی و گرمایی با روابط زیر داده می شوند [۵ و ۴].

$$\vec{j}_e = e \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \tau \left(-\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon_k} \right) (\vec{v}_k \cdot \vec{\Lambda}) \vec{v}_k, \quad \vec{\Lambda} = e \vec{E} - \frac{\xi}{T} \vec{\nabla} T, \quad \vec{v}_k = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{k}}, \quad (4)$$

$$\vec{j}_e = \sigma \vec{E} - \sigma S \vec{\nabla} T, \quad (5)$$

$$\vec{j}_Q = \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} (\varepsilon - \mu) \tau \left(-\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon_k} \right) (\vec{v}_k \cdot \vec{\Lambda}) \vec{v}_k, \quad (6)$$

$$\vec{j}_Q = \sigma_s T \vec{E} - \sigma_T \vec{\nabla} T. \quad (7)$$

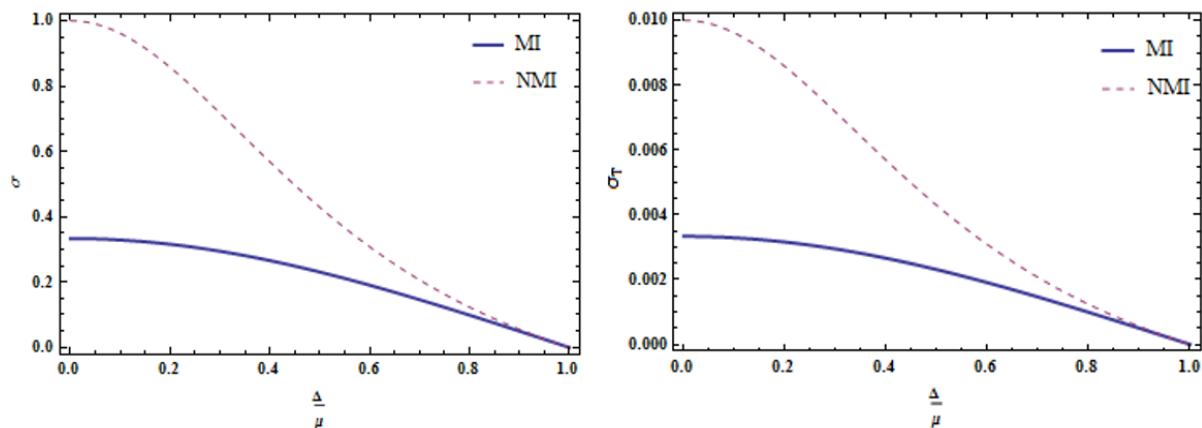
در این روابط σ نشانگر رسانندگی الکتریکی، \vec{E} میدان الکتریکی خارجی، μ پتانسیل شیمیایی، S ضریب سی بک، σ_T رسانندگی گرمایی و T دما می باشد. رابطه (۵) نشان می دهد در نبود میدان الکتریکی خارجی و حضور گرادیان دمایی داخل صفحه عایق توپولوژیکی، تنها در صورتی جریان الکتریکی وجود دارد که σS مخالف صفر باشد (σS نمایانگر این است که در غیاب میدان الکتریکی، گرادیان دمایی چه مقدار می تواند جریان الکتریکی تولید کند). از روابط بالا رسانندگی الکتریکی و گرمایی برای عایق توپولوژیکی گاف دار آلییده با ناخالصی مغناطیسی و غیر مغناطیسی بصورت زیر بدست می آیند:

$$\sigma^{NMI} = \frac{e^2 \hbar v_F^2}{A \pi v_0^2} \frac{\mu^2 - \Delta^2}{\mu^2 + 3\Delta^2}, \quad \sigma^{MI} = \frac{e^2 \hbar v_F^2}{A \pi J^2 s_z^2} \frac{\mu^2 - \Delta^2}{3\mu^2 + \Delta^2} \quad (8)$$

$$\sigma_T^{NMI} = \frac{\hbar v_F^2 \pi k_B^2 T (\mu^2 - \Delta^2)}{A v_0^2 3(\mu^2 + 3\Delta^2)}, \quad \sigma_T^{MI} = \frac{\hbar v_F^2 \pi k_B^2 T (\mu^2 - \Delta^2)}{A J^2 s_z^2 3(3\mu^2 + \Delta^2)} \quad (9)$$

که MI نشانگر ناخالصی مغناطیسی و NMI نشانگر ناخالصی غیر مغناطیسی می باشد. همانطور که در روابط (۸) دیده می شود در صورتی که شدت پتانسیل های پراکندگی یکسان باشد، به عبارت دیگر $v_0 = J s_z$ ، رسانندگی الکتریکی در حضور ناخالصی غیر مغناطیسی $\frac{3\mu^2 + \Delta^2}{\mu^2 + 3\Delta^2}$ برابر رسانندگی الکتریکی در حضور ناخالصی مغناطیسی است، این مقدار به کمیت $\frac{\Delta}{\mu}$ بستگی دارد که با افزایش $\frac{\Delta}{\mu}$ به مقدار یک میل می کند. برای توضیح این رفتار، رسانندگی های گرمایی و الکتریکی (در واحد $\frac{c^2}{J \cdot s}$) را به ازای $k_B T \ll \mu$ و پتانسیل شیمیایی بزرگتر از گاف، در شکل (۱) رسم کرده ایم.

همانطور که دیده می شود در غیاب گاف انرژی ($\Delta = 0$) رسانندگی ها در حضور ناخالصی غیر مغناطیسی، بیشتر از مغناطیسی است که دلیل این رفتار، وجود پراکندگی به عقب در حضور ناخالصی مغناطیسی می باشد.



شکل ۱: نمودار سمت راست: رسانندگی گرمایی و نمودار سمت چپ: رسانندگی الکتریکی عایق توپولوژیکی آلییده با ناخالصی مغناطیسی و

غیر مغناطیسی بر حسب تغییرات $\frac{\Delta}{\mu}$

از روابط (۴) تا (۷) ضریب سی بک برای سیستم با ناخالصی مغناطیسی و غیرمغناطیسی بصورت زیر حاصل می

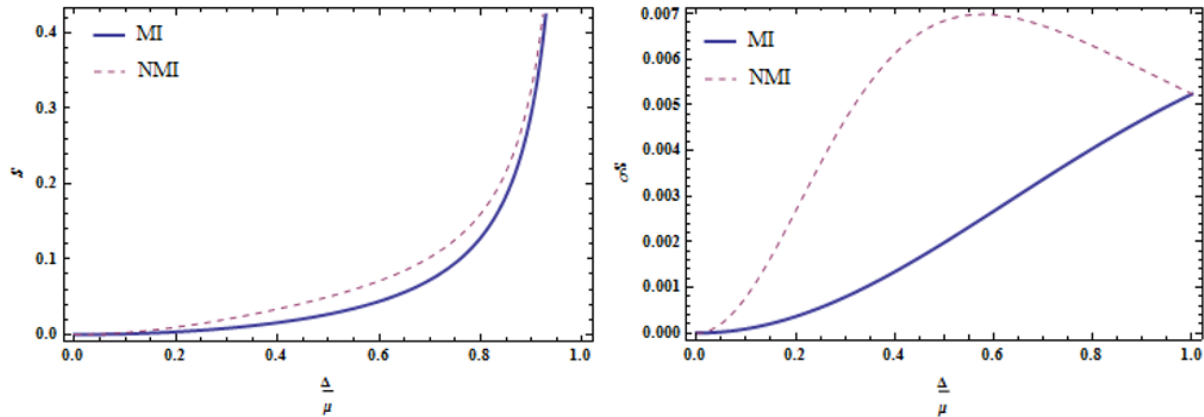
شود:

$$S^{NMI} = \frac{8k_B^2 \Delta^2 \mu \pi^2 T}{3e(\mu^2 - \Delta^2)(\mu^2 + 3\Delta^2)}, \quad S^{MI} = \frac{8k_B^2 \Delta^2 \mu \pi^2 T}{3e(3\mu^2 + \Delta^2)(\mu^2 - \Delta^2)} \quad (10)$$

در شکل (۲)، ضریب S (در واحد $\frac{J}{K \cdot c}$) و σS بر حسب پارامتر $\frac{\Delta}{\mu}$ رسم شده است. همانطور که در نمودار سمت چپ

می بینیم عایق توپولوژیکی آلییده با ناخالصی مغناطیسی ضریب سی بک کوچکتری نسبت به عایق توپولوژیکی آلییده با

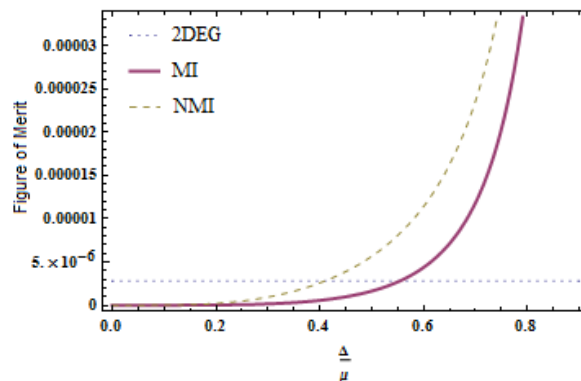
ناخالصی غیر مغناطیسی دارد. نمودار سمت راست نشان می‌دهد که با افزایش $\frac{\Delta}{\mu}$ ، σS در هر دو سیستم روند افزایشی دارد اما سیستم آلاییده با ناخالصی غیر مغناطیسی دارای مقدار بیشینه در مقدار $\frac{\Delta}{\mu} \approx 0.57$ می‌باشد.



شکل ۲: نمودار سمت راست: تغییرات σS و نمودار سمت چپ: تغییرات ضریب سی بک در عایق توپولوژیکی آلاییده با ناخالصی مغناطیسی و غیر مغناطیسی بر حسب $\frac{\Delta}{\mu}$ را نشان می‌دهد.

در انتها برای تعیین میزان کارکرد سیستم از نقطه نظر ترموالکتریکی نمودار بازدهی^۳ $(Z = \frac{\sigma S^2}{\sigma_T - \sigma S^2 T})$ بر حسب

تغییرات $\frac{\Delta}{\mu}$ آورده شده است. بازدهی مربوط به سیستم آلاییده با ناخالصی مغناطیسی و غیر مغناطیسی با افزایش اندازه گاف افزایش می‌یابد و به صورت کلی وقتی سیستم با ناخالصی غیر مغناطیسی آلاییده شود کارآمد تر است، به عبارتی این سیستم توانایی بیشتری در تبدیل گرما به الکتریسیته دارد. همچنین نمودار بازدهی یک گاز الکترونی دو بعدی را نیز برای قیاس رسم کرده ایم، همانطور که دیده می‌شود بازدهی عایق توپولوژیکی بیشتر از گاز الکترونی دو بعدی است، دلیل این رفتار به برهمکنش اسپین-مدار برمی‌گردد که در عایق توپولوژیکی بسیار قوی بوده اما در گاز الکترونی دو بعدی، این برهمکنش وجود ندارد.



شکل ۳: نمودار بازده سیستم های گاز الکترونی دو بعدی، عایق توپولوژیکی آلاییده با ناخالصی مغناطیسی و غیر مغناطیسی بر حسب تغییرات $\frac{\Delta}{\mu}$

^۳ Thermoelectric Figure of Merit

نتیجه گیری

در این مقاله به بررسی خواص ترابرد گرمایی و الکتریکی عایق توپولوژیکی در حضور ناخالصی های مغناطیسی و غیر مغناطیسی پرداختیم. با استفاده از رهیافت بولتزمن در تقریب زمان واهلش رسانندگی الکتریکی، رسانندگی گرمایی، ضریب سی بک و همچنین بازدهی ترموالکتریک را در عایق های توپولوژیکی بدست آورده ایم. تفاوت اصلی عایق توپولوژی آلاینده شده با ناخالصی مغناطیسی نسبت به ناخالصی غیرمغناطیسی، وجود پراکندگی به عقب در این دسته مواد می باشد و همین عامل باعث می شود رسانندگی الکتریکی و گرمایی این مواد، کمتر از عایق های آلاینده شده با ناخالصی غیرمغناطیسی (بار) شود. این عامل، بصورت آشکار روی σS و ضریب سی بک نیز تاثیر می گذارد که بصورت کامل در متن توضیح داده شده است.

مراجع

1. G.Rosenberg and M.Franz, Physical Review **B 85**, 195119, (2012).
2. J. Lu et al, "Non-magnetic impurities and in-gap bound states in TIs", New J.phys.13, 103016(2011).
۳. امیر سبزعلی پور، پایان نامه کارشناسی ارشد، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، ۱۳۹۳.
4. G.D. Mahan, Many-Particle Physics (Plenum Press, 1990).
5. Jasprit Singh, Electronic and Optoelectronic Properties of Semiconductor Structures, (Cambridge University Press, Cambridge, 2003).