

Сведения о выполненных работах в 2019 году
по проекту «**Управление электронными свойствами топологически
нетривиальных фаз**»,
поддержанному Российским научным фондом
Соглашение № 18-12-00169

Руководитель д-р физ.-мат. наук Еремеев Сергей Владимирович

В течение года работа, направленная на теоретическое исследование способов модификации электронной структуры топологически нетривиальных фаз велась по нескольким направлениям: (1) изучение топологически защищенных электронных состояний на границах топологических изоляторов, обладающих магнитным порядком; (2) изучение поглощения электромагнитного излучения в дираковских полуметаллах в квантующем магнитном поле; (3) изучение электронной структуры новых слоистых топологических изоляторов и гетероструктур на их основе; (4) изучение допирования топологических изоляторов атомами немагнитных элементов; (5) изучения роли химического фактора в формировании краевых состояний в двумерных топологических изоляторах; (6) исследование электронной структуры и динамической стабильности тонких пленок топологических изоляторов.

(1) Предложен универсальный аналитический подход для моделирования квантового аномального эффекта Холла в гетероструктурах при различных способах введения магнитного порядка в плёнку топологического изолятора. Показано, что эффективный краевой потенциал может заметно влиять, как на дисперсию краевых состояний, так и на само их существование. Исследования проведенные в рамках широкой международной коллаборации позволили предсказать и подтвердить экспериментально существование первого собственного антиферромагнитного топологического изолятора, слоисто-блочного ван-дер-Ваальсового соединения MnBi_2Te_4 , где исполнителями проекта выполнены расчеты топологических характеристик и рассчитаны спектры боковых поверхностей, сохраняющих S -симметрию (композицию симметрии по обращению времени и пространственного смещения вдоль оси c), которые демонстрируют вследствие симметрии безщелевой характер. При изучении тонких пленок MnBi_2Te_4 обнаружено чередование топологических фаз квантового аномального эффекта Холла и квантового аномального эффекта Холла с нулевым плато в зависимости от толщины пленки, для которых были рассчитаны краевые спектры, демонстрирующие наличие безщелевых или щелевых состояний, соответственно. Теоретические исследования гетероструктур на основе селенида висмута и магнитных пленок позволило предсказать новые структуры для реализации квантового аномального эффекта Холла.

(2) Проведено изучение поглощения электромагнитного излучения в дираковских полуметаллах в квантующем магнитном поле и найден универсальный закон поглощения электромагнитных волн при изменении их частоты или при увеличении магнитного поля вследствие уширения линии циклотронного бесстолкновительного

затухания электромагнитных волн. Найдены новые режимы распространения электромагнитных волн и новые сопутствующие им эффекты. Обнаружена универсальная зависимость фазовой скорости геликона от величины магнитного поля при уменьшении числа заполненных уровней Ландау. Найдены новые режимы распространения геликона и новые сопутствующие им осцилляционные эффекты гигантского затухания этой электромагнитной волны.

(3) Проведенное изучение серии топологических изоляторов $A^{IV}Bi_4Te_{7-x}Se_x$ со слоисто-блочной ван-дер-ваальсовой структурой, в которой чередуются блоки различной толщины и состава выявило, с одной стороны, зависимость спектра поверхностных дираковских состояний и их пространственной локализации от окончания поверхности, связанную, как и в родственных материалах, с двойной инвертацией щели обусловленной структурой материала, а с другой, позволило обнаружить для некоторых поверхностей нехарактерную для большинства топологических состояний дисперсию дираковского состояния, которая ранее наблюдалась только в материалах представляющих из себя структурную комбинацию слоёв топологического изолятора и топологического кристаллического изолятора. Также проанализирован эффект разупорядочения атомов в подрешетке халькогена. Исследование гетероструктур, состоящих из топологического изолятора и кристаллического топологического изолятора ($PbBi_4Te_7/SnTe$) выявило зависимость интерфейсного спектра и пространственной локализации интерфейсных состояний от модели границы — жесткий интерфейс или диффузионно-встраиваемый интерфейс, которые характеризуются принципиально различным характером интерфейсного потенциала. Показано что в случае жесткого интерфейса генерируются множественные тривиальные состояния и выживает топологическое состояние в центре зоны Бриллюэна, тогда как в случае встраиваемого интерфейса топологические состояния в Гамма аннигилируют и выживают только состояния кристаллического топологического изолятора в точках M на краю зоны.

(4) На основе первопринципных расчетов показано, что большинству рассмотренных атомов 1, 2 и 13 групп выгоднее занимать позиции замещения атома Bi или атома Se крайнего слоя пятислойного блока в матрице Bi_2Se_3 , чем позиции внедрения. Исключение составляют атомы Li и Na , для которых более выгодными являются октаэдрические междоузельные позиции внутри ван-дер-Ваальсовой пустоты Bi_2Se_3 . Позиция замещения атома Se центрального слоя пятислойного блока Bi_2Se_3 для всех рассмотренных атомов является существенно невыгодной.

(5) Исследование краевых состояний на краях с индексами $[100]$ и $[010]$ в двумерных топологических изоляторах на основе тонких пленок $GaSnTe$ показало, что наряду со спин-геликоидальными топологическими состояниями, вследствие неполной координации атомов на крае, в спектре присутствуют тривиальные состояния оборванной связи. Вследствие того, что связи $Ga-Te$ имеют строго направленный ковалентный характер, и характеризуются значительным зарядовым переносом, ненасыщенное окружение атомов галлия значительно влияет на электронную структуру края плёнки. Обнаружена сильная конфигурационная зависимость

дисперсии и количества тривиальных состояний от локального окружения при одной и той же ориентации края и от плотности упаковки атомов в направлении перпендикулярном краю.

б) Исследование тонких пленок GaSnTe и InSnTe ван-дер-ваальсовых соединений состоящих из шести-слойных блоков, которые в объеме являются топологическим металлом и топологическим изолятором с очень узкой щелью, показало, что одноблочные и двублочные пленки обоих материалов являются динамически стабильными. При этом тонкие пленки InSnTe являются топологически тривиальными изоляторами, тогда как одноблочные пленки GaSnTe являются двумерными топологическими изоляторами с достаточно большой щелью и демонстрируют наличие краевого дираковского состояния. Двублочные пленки несмотря на металлический характер спектра также имеют топологическое инвертирование зон на уровне Ферми и краевое дираковское состояние возникает в виде резонанса в области объёмного континуума.