

Сведения о выполненных работах в 2021 году
по проекту «**Управление электронными свойствами топологически
нетривиальных фаз**»,
поддержанному Российским научным фондом
Соглашение № 18-12-00169

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

В течение года работа, направленная на теоретическое исследование электронной структуры топологически нетривиальных фаз велась по нескольким направлениям. Это изучение влияния пространственных неоднородностей поверхностного потенциала, возникающего за счет распределения заряженных антиузельных дефектов, и формирование магнитных доменных стенок в антиферромагнитном топологическом изоляторе MnBi_2Te_4 . Изучение топологии электронных спектров тонких плёнок MnSb_2Te_4 и пленок более сложных соединений серии $(\text{MnSb}_2\text{Te}_4)(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_n$ при разных типах намагниченности – в собственном антиферромагнитном состоянии и во внешнем магнитном поле. Изучение электронной структуры двумерных магнитных тонких плёнок на основе структурных блоков магнитного изолятора MnBi_2Se_4 и топологического изолятора Bi_2Se_3 при антипараллельной и параллельной магнетизации в слоях MnBi_2Se_4 . Изучение электронной структуры топологических изоляторов поверхностно-допированных кобальтом. Исследование электронных свойств гетероструктуры, состоящей из подложки MnBi_2Te_4 и тонкого поверхностного слоя изолятора с гигантским рашбовским расщеплением BiTeI , а также гетероструктур на основе Bi_2TeI и Bi_2TeBr , содержащих слои BiTeI и родственного соединения BiTeBr и бислои висмута. Также исследована электронная структура интерфейса сверхпроводящей пленки свинца, от одного до трёх монослоёв, и топологического изолятора Bi_2Te_3 .

Было установлено, что электростатический поверхностный потенциал определяет величину и знак эффективного обменного поля, влияющего на поверхностные электронные состояния в собственных антиферромагнитных топологических изоляторах (АФМ ТИ). Пространственные неоднородности поверхностного потенциала, например, связанные с флуктуациями распределения заряженных антиузельных дефектов BiMn и MnBi в соединении MnBi_2Te_4 , могут провоцировать возникновение доменной структуры обменного поля. В модели уединённой жёсткой доменной стенки показано, что помимо модуляции поверхностной обменной щели или смещения двумерного дираковского конуса в импульсном пространстве возникает связанное одномерное бесщелевое состояние, индуцированное границей между антифазными доменами. Аналитически описаны основные характеристики связанного состояния, такие как энергетический спектр, спиновая поляризация и пространственная локализация, и их зависимости от ориентации оси магнитной анизотропии. Эти зависимости подтверждаются детальными расчётами в приближении сильной связи. Найденные состояния имеют топологическое происхождение и обладают свойством киральности. Предсказано существование «тяжелого» фермиона (бездисперсионной спин-поляризованной

квазичастицы) на магнитной доменной стенке на поверхности планарного АФМ ТИ, что обусловлено киральной симметрией системы. В многодоменном случае спектр низкоэнергетических состояний размывается и приобретает щель. Также изучена модификация поверхностных состояний под влиянием сложных текстур намагниченности типа блоховской и неелевской доменной стенки. Исследованы электронные состояния, индуцированные неколлинеарными текстурами намагниченности в АФМ ТИ. Такие текстуры реализуются на поверхности (0001) образцов MnBi_2Te_4 , помещённых во внешнее поле. Проведена классификация состояний на топологические и тривиальные и описана эволюция их спектров с изменением взаимной ориентации намагниченностей в доменах. Обозначены условия для возникновения «тяжелого» фермиона на поверхности АФМ ТИ с одноосной анизотропией. Предложены способы экспериментального обнаружения одномерного состояния, связанного с доменной стенкой, и обсуждён возможный вклад этого состояния в новые квантовые эффекты на поверхности АФМ ТИ типа MnBi_2Te_4 .

Исследование топологии электронных спектров тонких плёнок MnSb_2Te_4 толщиной от одного до восьми семислойных структурных блоков показало, что в пределе тонкой пленки не только магнитная фаза, но также электронный спектр и топологические свойства сильно зависят от толщины. Спектр пленки толщиной в один блок демонстрирует непрямую щель, значительно большую, чем в плёнке родственного соединения MnBi_2Te_4 . Расчеты числа Черна показывают, что такая плёнка является топологически тривиальным ферромагнетиком. При увеличении толщины до 2, 3 и 4 блоков имеется межслойный антиферромагнетизм (компенсированный или некомпенсированный для четной и нечетной толщин) и ширина щели последовательно уменьшается с ростом толщины пленки, при этом число Черна для всех этих плёнок нулевое. Однако, в ферромагнитной фазе (что может быть достигнуто приложением внешнего магнитного поля), число Черна оказывается равным -1 в случае пленки толщиной 4 блока. Это означает, что такая плёнка MnSb_2Te_4 является изолятором Черна, который должен обеспечивать квантовый эффект Холла во внешнем магнитном поле без уровней Ландау, как недавно подтвердилось для пленки родственного соединения MnBi_2Te_4 . Обращение намагниченности данной пленки MnSb_2Te_4 дает изолятор Черна характеризующийся $C = +1$, тем самым доказывая так называемое квантовое состояние Холла с нулевым плато проводимости в скомпенсированном антиферромагнитном состоянии этой пленки, что является характеристикой фазы аксионного изолятора (AXI). При толщине плёнки в пять блоков топологическая фаза снова оказывается тривиальной. Как и в случае с пленкой толщиной 4 блока, мы также прогнозируем собственные состояния аксионного изолятора для пленок толщиной 6 и 8 блоков. Достаточно толстая пленка, толщиной семь блоков MnSb_2Te_4 , находится в фазе квантового аномального изолятора Холла (QANI), но при этом запрещённая щель очень мала, ~ 5 мэВ. Таким образом, как и в пленках MnBi_2Te_4 , пленки MnSb_2Te_4 также демонстрируют чередование топологических фаз AXI/QANI, однако из-за более слабого спин-орбитального взаимодействия в MnSb_2Te_4 , они появляются при больших толщинах чем в пленках MnBi_2Te_4 . Рассмотрение сэндвичных структур типа $\text{MnSb}_2\text{Te}_4/(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_n/\text{MnSb}_2\text{Te}_4$ с разным количеством структурных блоков

Sb_2Te_3 , от 1 до 3, которые являются тонкими пленками соединений $(\text{MnSb}_2\text{Te}_4)(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_n$ с окончанием магнитным блоком, показало что для $n = 1$ и 2 такие пленки имеют топологически тривиальную фазу как для параллельного, так и для антипараллельного намагниченностей в магнитных блоках, тогда как пленка с $n = 3$ оказывается в фазах AFM AXI и изолятора Черна для AFM и FM состояний, соответственно. Аналогичное поведение также ожидается для $n = 4$ и 5.

Изучение электронной структуры двумерных магнитных тонких плёнок вида $(\text{Bi}_2\text{Se}_3)_m(\text{MnBi}_2\text{Se}_3)(\text{Bi}_2\text{Se}_3)_n(\text{MnBi}_2\text{Se}_3)(\text{Bi}_2\text{Se}_3)_m$, где магнитные блоки слоистого антиферромагнетика MnBi_2Se_4 разделены n блоками топологического изолятора Bi_2Se_3 , а также m блоков Bi_2Se_3 могут находиться на поверхности (n и m могут принимать в том числе и нулевые значения) при антипараллельной и параллельной намагниченности в слоях MnBi_2Se_4 показало, что тонкопленочные гетероструктуры, в которых магнитные блоки размещены на поверхности или вблизи поверхности с прослойкой топологического изолятора не менее 3 блоков, являются потенциальными кандидатами для реализации топологических краевых состояний в относительно большой запрещенной зоне. В то же время гетероструктуры, в которых число слоев n является небольшим или такая прослойка отсутствует, а также гетероструктуры в которых магнитные блоки расположенные глубоко под поверхность, характеризуются небольшой (или даже отсутствующей) гибридационной щелью и являются топологически тривиальными. При этом в гетероструктурах с $m = 1$ и $n = 3$ и более возможно переключение из тривиальной в топологическую фазу за счет приложения внешнего магнитного поля, что подтверждается возникновением спин-поляризованного одномерного состояния в рассчитанном одномерном спектре края пленки при включении поля и его отсутствии в случае антипараллельной намагниченности магнитных блоков.

Проведены расчеты поверхностной электронной структуры топологических изоляторов с поверхностным блоком допированным кобальтом в позициях замещения $\text{Bi}(\text{Sb})$ в бинарных топологических изоляторах Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 и Sb_2Te_3 и исследовано влияние концентрации магнитного допанта на величину магнитной щели в дираковском состоянии. При концентрации кобальта, когда каждый восьмой атом пниктогена в поверхностном блоке замещен атомом Co , было обнаружено что магнитные моменты Co имеют предпочтительную ориентацию спина перпендикулярно плоскости поверхности. Такая спиновая конфигурация атомов кобальта, наряду с локализацией дираковского состояния в основном во внешнем блоке и около первого ван-дер-ваальсова промежутка, где оно перекрывается с орбиталями Co , обеспечивает наличие щели в поверхностном спектре топологических изоляторов, которая равная 14 и 12 мэВ для Bi_2Te_3 и Bi_2Se_3 соответственно, а для Sb_2Te_3 она заметно больше, 43.5 мэВ. Однако уменьшение концентрации Co в Sb_2Te_3 путем создания больших сверхячеек приводит к почти линейному уменьшению щели. В целом ширина щели в бинарных топологических изоляторах хорошо согласуется с экспериментальной щелью в соединении BiSbTeSe_2 , поверхностно допированном кобальтом.

Исследование электронных свойств гетероструктуры, состоящей из подложки MnBi_2Te_4 и тонкого поверхностного слоя BiTeI выявило зависимость спектра от типа контакта между ними (Te-Te или I-Te). В случае контакта Te-Te наблюдается слабое изменение электростатического потенциала в области вблизи границы с вакуумом по сравнению со случаем чистой поверхности MnBi_2Te_4 . Данный вариант контакта может рассматриваться как естественное продолжение поверхности соединения MnBi_2Te_4 . При этом наличие пленки BiTeI приводит к модификации топологического поверхностного состояния, заключающейся в смещении локализации топологического состояния в область трёхслойного блока и, таким образом, в уменьшении его обменного расщепления. При увеличении расстояния между плёнкой и подложкой, а также при уменьшении вклада спин-орбитального взаимодействия происходит увеличение обменной запрещённой щели. В случае контакта I-Te возникает значительное изменение градиента потенциала вблизи границы с вакуумом. В случае данного контакта наблюдается индуцирование гибридного четырёхзонного состояния являющегося комбинацией конуса Дирака и состояния Рашбы. При этом взаимодействие между подложкой и плёнкой приводит к возникновению гибридной щели. Наличие магнитного момента на подложке приводит к возникновению обменного расщепления двух крамерсовских вырождений в четырёхзонном состоянии. Это индуцирует транспортный отклик за счёт конечного значения некантованной холловской проводимости в отсутствие внешнего магнитного поля, что является признаком исследуемого четырёхзонного состояния в транспортных экспериментах.

Проведенные расчёты электронной структуры тонких пленок соединений Bi_2TeI и Bi_2TeBr показали, что в отличие от соответствующих объёмных фаз и от бислоя $\text{Bi}(111)$, характеризующихся ненулевым топологическим индексом, пленки Bi_2TeI и Bi_2TeBr являются топологически тривиальными. В асимметричной гетероструктуре, где с одной стороны от бислоя висмута расположены слои $-\text{I-Bi-Te}$, а с другой $-\text{Br-Bi-Te}$, в силу исчезновения инверсионной симметрии происходит снятие спинового вырождения зон и за счёт их расщепления спектр становится полуметаллическим, с практически нулевой плотностью состояний на уровне Ферми. С помощью небольших вариаций химпотенциала возможно переключение на спин-поляризованные состояния валентной зоны или зоны проводимости, которые формируют два Ферми контура. Спиновая текстура состояний проводимости в целом подобна текстуре рашбовских состояний, тогда как спиновая текстура валентных зон является более анизотропной.

Показано, что осаждение монослойной пленки Pb приводит к смещению объёмного континуума электронных состояний Bi_2Te_3 вниз по сравнению с чистым Bi_2Te_3 . Вместе с тем точка Дирака смещается в сторону большей энергии в объёмной запрещённой зоне, и такое смещение более значимо в случае двух монослоев Pb . Обнаружена осциляция значений работы выхода в зависимости от толщины пленки Pb , которая типична для свободных пленок Pb . Показано, что электронная структура поверхности сильно зависит от количества монослоев Pb .