

Сведения о выполненных работах в 2018 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 электронной структуры двумерных топологических изоляторов в зависимости от толщины, типа края, влияния подложки; (2) изучение электронной структуры сложных многокомпонентных как слоистых, так и не слоистых трёхмерных топологических изоляторов в зависимости от типа окончания поверхности; (3) изучение электронных, транспортных и магнетотранспортных свойства гетероструктур на основе топологических изоляторов; (4) управление свойствами топологических систем за счёт внешних полей; (5) изучение поверхностной диффузии примесных атомов, которые могут служить для модификации поверхности топологических изоляторов.

(1) На основе первопринципных ДФТ расчётов и расчётов в методе сильной связи проанализирована краевая электронная структура тонких плёнок слоистых топологических изоляторов Bi_2Te_3 и PbBi_2Te_4 , изучена топология электронной структуры недавно синтезированного двумерного соединения In-Sb . Показано, что геометрическое строение края двумерных Bi_2Te_3 и PbBi_2Te_4 на прямую влияет как на дисперсию топологического состояния, так и на положение точки Дирака. Также установлено, что геометрическое строение края влияет на количество состояний оборванной связи: в случае края типа "zigzag" таких состояний больше. Установлено, что спектр поверхностных состояний $(\text{In-Sb})/\text{Si}(111)-2\text{sq}^3 \times 2\text{sq}^3$ имеет инвертированную щель на уровне Ферми, определяемую рху орбиталями сурьмы и индия, и характеризуется нетривиальным значением топологического инварианта. При этом определяющую роль в формировании фазы двумерного топологического изолятора в этой системе играет взаимодействие с кремниевой подложкой, при отсутствии которой происходит металлизация спектра. Первопринципные расчёты одномерного спектра системы $(\text{In-Sb})/\text{Si}(111)-2\text{sq}^3 \times 2\text{sq}^3$ показывают наличие дираковского краевого состояния, локализованного на краю канавки в слое (In-Sb) в точке Γ и множественных состояний оборванной связи при больших значениях волнового вектора.

(2) Проведены теоретические исследования объёмной электронной структуры, её топологии и поверхностной электронной структуры в зависимости от типа окончания в слоистых соединениях PbBi_4Te_7 , $\text{PbBi}_6\text{Te}_{10}$, $\text{PbBi}_4\text{Te}_4\text{S}_3$, Bi_2TeBr и Bi_3TeBr , а также в неслоистых соединениях X_3Bi (KNa_2Bi , K_3Bi и Rb_3Bi). Исследования проводились как в рамках методов теории функционала плотности, так и рамках метода сильной связи с использованием гамильтониана в базисе функций Ванье. Показано, что в слоистых топологических изоляторах на основе свинца, вследствие

наличия различных структурных блоков энергия дираковского состояния и его дисперсия зависят от окончания поверхности. Этот эффект приводит к появлению множественных дираковских состояний в фотоэмиссионных экспериментах на поверхности скола, содержащей террасы с различным типом окончания. Кроме того, были детально изучены рашбовские состояния вблизи дна зоны проводимости, которые обычно связывают с поверхностным изгибом зон, возникающим за счёт адсорбции примесей. На основе ранее предложенной интеркаляционной модели и детального анализа объёмного спектра дано теоретическое объяснение экспериментальному факту зависимости числа рашбовских состояний от количества различных типов террас в системе. В рамках проведенного исследования также предсказан новый класс топологически нетривиальных материалов на основе BiTeBr и бислоёв висмута. Показано, что на поверхности этих материалов формируются особые спин-поляризованные топологические состояния, возникающие вследствие специфического инвертирования объёмных зон. В случае Bi_2TeBr такое топологическое состояние образовано двумя ветками, характеризующимися различной пространственной локализацией, а также разной симметрией атомных орбиталей. Анализ электронной структуры показал зависимость дисперсии топологических состояний от типа окончания поверхностей. В случае Bi_3TeBr обнаружено, что топологическое состояние имеет форму конуса, причем положение точки Дирака по энергии существенно зависит от типа окончания поверхности, что напрямую связано с эффектом изгиба зон на соответствующей поверхности. В рамках исследования было показано, что соединения KNa_2Bi , K_3Bi и Rb_3Bi являются топологически нетривиальными безщелевыми изоляторами с касанием валентной зоны и зоны проводимости строго в Γ -точке. Показано, что улучшение обменно-корреляционного функционала приводит к уменьшению энергетической щели, образованной Γ_8 и Γ_6 зонами. При этом топологический инвариант $Z_2 = 1$. Найдено унитарное преобразование, которое переводит построенную кр модель в известную модель Кейна, широко применяемую для соединений с $\text{Fm}\bar{3}\text{m}$ пространственной группой. Рассмотрение плёнок соединений KNa_2Bi , K_3Bi и Rb_3Bi показало возникновение изгиба зон в области до 50 Ангстрем вблизи границы с вакуумом.

(3) Исследованы электронные, транспортные и магнетотранспортные свойства гетероструктур, в которых пленки трехмерного топологического изолятора разделены пленками нормального изолятора. На примере трехслойной структуры, состоящей из тонкой пленки топологического изолятора, сэндвичированной нормальным изолятором, построен эффективный двумерный кр гамильтониан, описывающий электронные характеристики системы в континуальном приближении. Определен топологический холловский отклик системы в зависимости от основных параметров структуры: деталей зонной структуры топологического изолятора; толщины пленки; силы потенциального и обменного рассеяния на интерфейсе между топологическим и нормальным изоляторами. Построены соответствующие фазовые диаграммы. В квазиклассическом приближении показано, что пространственные флуктуации этих параметров могут приводить к распаду пленки в интерфейсной плоскости на домены с топологически различными фазами. В рамках модели шероховатого интерфейса проанализированы возможные состояния, возникающие на доменных стенках между тривиальной и топологической фазами и между топологическими фазами с

различными индексами. Показано, что линейные дефекты в виде доменных стенок индуцируют возникновение связанных квази-одномерных спин-поляризованных состояний с линейным спектром. Аналитически описаны энергетические спектры, пространственная зависимость огибающей функции и спиновая структура этих состояний. На основе полученных результатов предложено обоснование потери идеального квантования холловской проводимости и проведены оценки параметров модели, при которых возможно избежать влияния шероховатости интерфейсов на спин-поляризованный электронный транспорт в реальных системах.

(4) Проведено исследование электронного спектра в дираковских материалах, помещенных в скрещенное электрическое и квантующее магнитное поля. Приведение к диагональному виду гамильтониана в четырехмерном дираковском пространстве и двумерном фоковском пространстве позволяет найти точное выражение для энергии и волновой функции квазичастиц как функции квантовых чисел и параметров проблемы – напряженностей электрического и магнитного полей. В этих условиях изучен спектр низкоэнергетических возбуждений в соединениях с несимметричной решеткой. Найдено точное выражение для спектра и волновой функции электронов в соединениях с цепочками петель, состоящих из нулей дираковского спектра в скрещенных магнитном и электрическом полях. Обнаружен новый квантовый фазовый переход из диэлектрического состояния в металлическое, управляемый внешними электрическим и магнитным полями в этих соединениях. Было показано, что при изменении магнитного и электрического полей щель в спектре электронных возбуждений обращается в ноль. Из закона сохранения квантовых чисел найдены области затухания Ландау продольных и поперечных коллективных возбуждений.

(5) Изучение адсорбции и диффузии атомов 1, 2 и 13 групп на поверхности (0001) слоистых топологических изоляторов $\text{Bi}_2\text{Se}(\text{Te})_3$ позволило выявить предпочтительные позиции адсорбции, особенности зарядового переноса и характер связи адсорбата с подложкой. Полученные с помощью метода упругой ленты диффузионные барьеры позволили определить диффузионные длины как функции температуры для разных адсорбатов. Показано, что вне зависимости от адсорбционного положения, механизм, определяющий энергетическую выгодность адсорбции является универсальным, а именно, адатомы располагаются в такой симметричной позиции, в которой возможно установление ионных, ионно-ковалентных или ковалентных связей с наибольшим числом атомов первых двух слоев подложки. Для всех рассматриваемых адатомов диффузия происходит путем перескоков из позиции типа ГЦК в позицию типа ГПУ через мостиковые позиции. Исключения составляют атомы бериллия на обеих подложках, демонстрирующие сложный энергетический профиль вдоль диффузионного пути, а также атомы бора, для которых не удалось надежно установить минимальный энергетический путь. С увеличением размера атома вдоль группы энергия активации диффузии по поверхности уменьшается. При комнатной температуре ($T = 300 \text{ K}$) диффузионные длины атомов на обеих поверхностях соотносятся как $\lambda(1) \geq \lambda(13) > \lambda(2)$, а для температур активации диффузии адатомов на поверхностях Bi_2Se_3 и Bi_2Te_3 справедливо $T_a(2) > T_a(13) > T_a(1)$.