

Сведения о выполненных работах в 2022 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, включающим в себя как исследование электронной структуры новых или гипотетических топологически нетривиальных магнитных материалов или гетероструктур на основе ранее известных материалов во внешних электрических и магнитных полях на основе расчётов в рамках теории функционала плотности, так и построение аналитических моделей для таких систем.

В рамках теории функционала плотности детально изучены атомная, электронная и магнитная структуры и влияние типа магнитного порядка на топологическую фазу недавно синтезированного соединения $\text{Mn}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ и родственного гипотетического соединения $\text{Mn}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$. Показано, что выгодной является структура с упорядочением атомных слоёв в подрешётке $(\text{MnTe})_2$ типа NiAs (ABAC), т.е. структура, аналогичная объёмному MnTe . Предсказано, что антиферромагнитное состояние является основным для такой структуры. При этом детальный анализ магнитного взаимодействия показал что в слоях марганца наблюдается анизотропия легкого конуса с углом ≈ 10 градусов. Рассчитанная критическая температура для $\text{Mn}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ (17 K) хорошо согласуется с магнитными измерениями (≈ 20 K). Для $\text{Mn}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ получена близкая критическая температура. При этом соединение $\text{Mn}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ является антиферромагнитным топологическим изолятором, тогда как $\text{Mn}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ имеет объёмный спектр Дираковского полуметалла. В условиях наведенного внешним магнитным полем ферромагнитного состояния показано, что $\text{Mn}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ является топологическим аксионным изолятором в котором на поверхности возникает Дираковское состояние с широкой обменной щелью. В ферромагнитной фазе соединения $\text{Mn}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ находится в топологической фазе Вейлевского полуметалла, характеризующегося присутствием пары вейлевских узлов вблизи уровня Ферми, что должно обеспечить формирование на поверхности фермиевских арок при небольшом допировании.

Исследование тонких пленок ван-дер-ваальсового соединения $\text{CrBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$, относящегося к семейству недавно предсказанных ферромагнитных топологических изоляторов, где нетривиальная топология объёмного спектра возникает вследствие наличия эффекта Яна-Теллера, показало, что среди рассмотренных пленок толщиной от 1 до 5 ван-дер-ваальсовых блоков щелевым спектром обладают пленки толщиной от 1 до 4 семислойных блоков. Анализ орбитального состава и спиновой текстуры зон показал, что в спектрах пленок толщиной в 2 и более блоков намагниченность перпендикулярно плоскости поверхности приводит к открытию щели в спектре.

Однако за счет того, что дисторсии Яна-Теллера нарушают инверсионную симметрию, в пленках толщиной 5 и более блоков обменные щели, возникающие за счет намагниченности имеют разную энергию и спектр в целом полуметаллический. Установлено, что зонная структура двублочной пленки обладает ненулевым числом Черна ($C = 1$), что указывает на возможность реализации квантового аномального эффекта Холла в данной системе.

Исследование влияния электрического поля на спектр топологических состояний объёмных сверхрешёток $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_n$ показало, что одинаковая напряженность электрического поля вызывает больший энергетический сдвиг поверхностных состояний в кристаллах с более сильным обменным полем, которое уменьшается с ростом n . Установлено, что величины спинового и орбитального магнитных моментов атомов поверхностного блока крайне слабо чувствительны к варьированию обменного и электрического полей. В то же время, ожидаемое значение градиента потенциала для состояний Дирака линейно зависит от приложенного электрического поля, уменьшаясь при увеличении отрицательных значений напряженности. Рассмотрение влияния электрического поля на электронную структуру гетероструктур на основе MnBi_2Te_4 и полярных полупроводников $\text{BiTeI}(\text{Br})$, где топологическое поверхностное состояние локализуется практически полностью в слое полярного полупроводника, показало, что внешнее электрическое поле линейно сдвигает конус Дирака по своему направлению относительно состояний локализованных на магнитном блоке.

В рамках предложенной континуальной модели установлена принципиальная роль электростатического поверхностного потенциала в формировании обменной щели в спектре топологических состояний в АФМТИ. Показано, что в зависимости от величины потенциала обменная щель может менять не только свою величину, но и знак. Построена соответствующая фазовая диаграмма, проясняющая микроскопический механизм вариации обменной щели в известных АФМТИ. Привлекая концепцию топологической доменной структуры объяснена причина существования бесщелевых состояний в случае сильных флуктуаций поверхностного потенциала. Полученные результаты позволяют дать унифицированную интерпретацию противоречивых данных по спектроскопическим измерениям поверхностных состояний в материале MnBi_2Te_4 . На основе эффективного гамильтониана тонкой плёнки ТИ с неколлинеарной текстурой намагниченности детально описан переход из фазы аксионного изолятора в фазу квантового аномального эффекта Холла во внешнем поле. Построена топологическая фазовая диаграмма в зависимости от степени неколлинеарности, толщины плёнки, величины поверхностного потенциала и материальных параметров АФМТИ. Рассчитаны дисперсия и кривизна Берри для двумерных электронных состояний для АФМ, ФМ и неколлинеарной текстур намагниченности. Проанализирована роль боковых граней плёнки и неколлинеарных доменных стенок в модификации электронного спектра плёнки АФМТИ. Представлена картина эволюции спектров двумерных и одномерных состояний в плёнке АФМТИ с изменением угла неколлинеарности.