

На правах рукописи

Русинов Игорь Павлович

**ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА
ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ИЗОЛЯТОРОВ
И МАТЕРИАЛОВ С РАСЩЕПЛЕНИЕМ РАШБЫ**

1.3.8. Физика конденсированного состояния

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Томск – 2024

Работа выполнена в Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет».

Научный консультант:

доктор физико-математических наук
Чулков Евгений Владимирович

Официальные оппоненты:

Саранин Александр Александрович, член-корреспондент Российской академии наук, доктор физико-математических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт автоматизации и процессов управления Дальневосточного отделения Российской академии наук, заместитель директора

Гареева Зухра Владимировна, доктор физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики молекул и кристаллов - обособленное структурное подразделение Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского Федерального исследовательского центра Российской академии наук, ведущий научный сотрудник, заведующая лабораторией теоретической физики

Столяров Василий Сергеевич, доктор физико-математических наук, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)», центр перспективных методов мезофизики и нанотехнологий Московского физико-технического института, руководитель

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН

Защита состоится "20" января 2025 г. в 10:00 на заседании диссертационного совета 24.1.262.01 на базе Физического института им. П.Н. Лебедева РАН по адресу: 119991, Москва, Ленинский проспект, д. 53.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Физического института им. П.Н. Лебедева РАН и на сайте www.lebedev.ru.

Автореферат разослан «_____» _____ 2024 г.

Ученый секретарь

диссертационного совета

доктор физико-математических наук

Золотко Александр Степанович

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Введение

Актуальность работы. Современное развитие электронной технологии базируется на использовании квантовых эффектов, которые позволяют миниатюризировать компонентную базу новых электронных устройств. Особую актуальность приобретает спинтроника (спиновая электроника) — активно развивающаяся область физики конденсированного состояния, в рамках которой исследуется возможность манипуляции в устройствах нового поколения спиновой степенью свободы электронов. В настоящее время уже существуют первые прототипы устройств спинтроники, к которым можно отнести, например, компьютерную память типа STT-MRAM (Spin Torque Transfer MRAM), а также трековую память. Компьютерная память работает на основе таких эффектов как гигантское магнетосопротивление и перенос спинового момента. Для последующего практического приложения необходим этапом является поиск кандидатов в материалы спинтроники с последующим исследованием их электронных и транспортных свойств. При решении данных задач широко применяются методы квантовой теории твердого тела, физики полупроводников, а также методы теории групп и топологии.

Существует два основных физических явления, на основе которых появляется возможность манипулировать спином в новых приборах спинтроники: спин-орбитальное взаимодействие и магнетизм. Первое из них связывает спиновый момент электронов с электростатическим потенциалом, что приводит к ряду эффектов в электронной структуре материалов. В соединениях, где нарушена инверсионная симметрия, проявляется так называемый эффект Рашбы. Важным следствием данного эффекта является возникновение прецессии спина, что позволяет управлять этой степенью свободы внешним электрическим полем. Таким образом, для исследователей и инженеров эффект Рашбы является основным при конструировании и исследовании приборов спинтроники. На основе широкого класса двумерных и объемных систем данный эффект позволяет получить важный элемент таких устройств — спиновый транзистор.

Другим важным примером, когда спин-орбитальное взаимодействие формирует свойства кристаллических твердых тел, является класс

топологических изоляторов. Он представляет собой экзотическое состояние квантовой материи, образующееся вследствие влияния данного взаимодействия на электронную структуру в окрестности уровня Ферми. За счет этого индуцируется инвертированный характер энергетической щели в полупроводниковых системах, что является причиной формирования бесщелевых поверхностных состояний с линейной дисперсией (состояний конуса Дирака). Эти бесщелевые состояния, защищенные симметрией обращения времени, не разрушаются при слабом атомном беспорядке или в присутствии немагнитных примесей. Указанные особенности электронной структуры делают данные материалы непохожими на привычные полупроводники и также представляют основу для создания ряда устройств спинтроники. Например, на основе топологических изоляторов возможно сконструировать интерконнект с хиральными проводящими каналами. При контакте со сверхпроводниками в таких электронных системах возникают так называемые фермионы Майораны, которые являются основой топологического квантового компьютера.

Особенности транспортных свойств систем с эффектом Рашбы (рашбовских систем) и топологических изоляторов напрямую связаны с деталями дисперсии их электронных состояний. При этом в материалах со значительным вкладом спин-орбитального взаимодействия, как правило, объемный спектр в области уровня Ферми оказывает значительное влияние на формирование поверхностной электронной структуры. Таким образом, актуальной задачей является всестороннее теоретическое исследование состояний краев объемной запрещенной щели, а также поверхностных состояний в данной энергетической области.

Следствием совместного вклада спин-орбитального взаимодействия и магнетизма в электронную структуру является формирование нетривиальной зонной топологии магнитных полупроводников. В рамках теоретического исследования подобных систем ранее был предсказан новый класс топологических соединений — антиферромагнитные топологические изоляторы. В данных системах набор симметрий может приводить к формированию бесщелевого характера электронного спектра поверхностей. При этом направление магнитного момента является удобным параметром, позволяющим управлять деталями топологических поверхностных состояний. Актуальной задачей является поиск материалов, являющихся антиферромагнитными топологическими изоляторами

и имеющих как можно большую температуру магнитного перехода, а также всестороннее теоретическое исследование электронной структуры их объема и поверхности.

Сочетание спин-орбитального взаимодействия и магнетизма формирует картину широкого набора экзотических эффектов в электронной структуре материалов, что также находит свое отражение в электронном транспорте в случае анизотропного магнетосопротивления или индуцированной током спиновой поляризации. Магнетизм в рашбовских системах способствует возникновению спинового взаимодействия Дзялошинского-Мория, что обуславливает формирование неколлинеарных спиновых структур таких как спиновые спирали, скирмионы и магнитные доменные стенки на поверхности объемных материалов или в тонких пленках. В свою очередь, указанные неоднородности являются важным фактором появления недавно предложенного эффекта хиральной орбитальной магнетизации. Также вызванное магнетизацией нарушение симметрии обращения времени в топологических изоляторах является источником квантового аномального эффекта Холла, топологического магнетоэлектрического эффекта и фазы аксионного изолятора в данных системах. При этом в настоящее время область, посвященная влиянию эффектов неоднородной намагниченности в электронной структуре магнитно допированных рашбовских систем и магнитных топологических изоляторов, является мало изученной.

Степень разработанности темы исследования. На сегодняшний день теория топологических изоляторов активно развивается, а количество известных соединений, принадлежащих к данному классу, все время растет. Основополагающие исследования электронной структуры топологических изоляторов в частности посвящены рассмотрению первых найденных примеров: гетероструктурам HgTe/CdTe , тетрадемитоподобным соединениям Bi_2Te_3 , Bi_2Se_3 и Sb_2Te_3 . Указанные соединения характеризуются значительным вкладом спин-орбитального взаимодействия в дисперсию состояний краев запрещенной щели, что является причиной топологически нетривиального характера их электронной структуры. Описанные свойства находятся в полном согласии с теоретическим описанием топологических изоляторов. В ранних работах на примере соединений Bi_2Te_3 и Bi_2Se_3 было установлено, что важным следствием нетривиальной топологии электронной структуры

является изменение в дисперсии состояний краев запрещенной щели, связанное с квазичастичными поправками, полученными в GW -приближении. Так, учет обменно-корреляционного взаимодействия в рамках данного метода приводит к уменьшению запрещенной щели, что является следствием инвертированного характера зон вблизи уровня Ферми и качественно отличает топологические изоляторы от хорошо известных тривиальных полупроводников.

Поиск материалов с сильным спин-орбитальным взаимодействием привел к обнаружению гигантского расщепления Рашбы объемных и поверхностных состояний в теллуриде висмута BiTeI . Позднее схожие свойства были обнаружены в родственных соединениях BiTeBr и BiTeCl . Данные материалы являются топологически тривиальными полярными полупроводниками и характеризуются прямой запрещенной щелью с экстремумами в области центра зоны Бриллюэна. При этом особенности вклада спин-орбитального взаимодействия в них приводят к взаимосвязи величины запрещенной щели с параметрами Рашбы зон, образующих ее края. Указанные особенности электронной структуры стимулировали исследователей к поиску возможности индуцирования в них топологического фазового перехода из топологически тривиальной фазы в фазу топологического изолятора за счет приложения внешнего возмущения. Данный переход был предложен для соединения BiTeI при его гидростатическом сжатии. Однако в литературе имеются противоречивые данные как на уровне теории, так и эксперимента.

Результаты широкого поиска примеров топологических изоляторов, показали, что к данному классу относятся целые группы материалов, образующих гомологические ряды. Как правило, они представляют собой повторяющуюся последовательность блоков с ионо-ковалентными химическими связями. Данные блоки связаны слабыми силами Ван дер Ваальса. Примерами таких соединений являются упомянутые тетрадемитоподобные соединения Bi_2Te_3 , Bi_2Se_3 , Sb_2Te_3 . Дальнейший поиск и исследования материалов на предмет их нетривиальной зонной топологии привел к обнаружению широкого класса систем с отличающимися от указанных соединений характером химических связей. Так были открыты топологические свойства интерметаллида Na_3Bi . Данное соединение является дираковским полуметаллом и, как и топологический изолятор, характеризуется инвертированным характером зон в области уровня Ферми. При этом в кристаллической структуре данного соединения отсутствует

промежуток Ван дер Ваальса, а химические связи имеют преимущественно полярный характер.

Теоретическое предсказание класса антиферромагнитных топологических изоляторов также стимулировало поиск подобных материалов. Так первым было предложено соединение $GdPtBi$. Однако до сих пор не было представлено экспериментального подтверждения его принадлежности к указанному топологическому классу. Поскольку большое количество известных топологических изоляторов принадлежит к Ван Дер Ваальсовским материалам, дальнейший поиск был сфокусирован в тех семействах соединений данной группы, которые содержат магнитные атомы. Осаждение пленок $MnSe$ на поверхность топологического изолятора Bi_2Se_3 привело к их интеркаляции внутрь верхнего пятислойного блока с формированием упорядоченной гетероструктуры $MnBi_2Se_4/Bi_2Se_3$, что указывало на возможность синтеза соединения, образованного семислойными блоками $MnBi_2Se_4$. В ранней экспериментальной работе представлены результаты синтеза и исследования родственного соединения $MnBi_2Te_4$. Позднее данное соединение было предложено в качестве фундамента для устройств на основе квантового эффекта Холла и топологического магнетоэлектрического эффекта.

Исследования магнитной морфологии поверхностей топологических систем свидетельствуют о формировании в них разного рода неоднородностей, например доменных стенок. При этом связь между формированием мультидоменной структуры и зонной топологии отмечалась в широком спектре экспериментальных и теоретических работ, однако детально не исследовалась.

Целью диссертационной работы является исследование закономерностей в зонной топологии, дисперсии объемных и спин-поляризованных поверхностных состояний вблизи уровня Ферми в топологических изоляторах и полупроводниках с расщеплением Рашбы, а также проведение отбора данных материалов для последующего приложения в устройствах спинтроники.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие **задачи**:

1. На примере гомологических рядов ранее синтезированных топологических изоляторов Bi_2Te_2X ($X=Te, Se, S$) и рашбовских полупроводников

BiTeX ($X=\text{I, Cl, Br}$) рассмотреть отклик в дисперсии состояний краёв запрещённой щели на квазичастичные поправки в рамках GW-приближения.

2. Установить отклик в электронных и топологических свойствах на изменение концентрации висмута n в ряду слоистых соединений Bi_nTeX ($X=\text{I, Cl, Br, } n=1,2,3$).

3. Изучить влияние внешних факторов таких как давление или одноосное сжатие (растяжение) на электронную структуру и топологические свойства материалов с сильным спин-орбитальным взаимодействием. Рассмотреть особенности протекания в них топологического фазового перехода.

4. Выявить роль магнитного порядка в электронной структуре и её топологических свойствах в материалах с сильным спин-орбитальным взаимодействием на примере гомологических рядов соединений $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)\cdot(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_n$ и $\text{MnSb}_2\text{Te}_4\cdot(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_n$ ($n=0,1,2$).

5. Определить влияние формирования магнитных доменных стенок на низкоразмерные электронные свойства в магнитных топологических изоляторах и магнитно-допированных рашбовских полупроводниках.

Научная новизна работы заключается в том, что были предложены новые соединения для технологического приложения в приборах спинтроники.

1. Впервые было детально проанализировано влияние квазичастичных поправок на дисперсию состояний краёв запрещенной щели в семействе соединений $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{X}$ ($X=\text{Te, Se, S}$). В случае $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{S}$ на основе проведённых поправок было получено, что особенности электронной структуры приводят к возможности приложения данного соединения в устройствах квантовых вычислений.

2. Впервые были проанализированы топологические свойства полупроводников с гигантским спин-орбитальным расщеплением Рашбы BiTeX ($X=\text{I, Cl, Br}$) при их гидростатическом сжатии с учетом имеющих место кристаллических фазовых переходов. Среди указанных соединений топологический переход возможен в BiTeI , что связано с наименьшей величиной запрещённой щели в нём.

3. Впервые была исследована электронная структура не слоистых соединений KNa_2Bi , K_3Bi и Rb_3Bi . Проанализирована взаимосвязь особенностей химических связей с деталями поверхностной электронной структуры. Она заключается в формировании на поверхности данных материалов тривиальных

состояний и сложной дисперсии топологических состояний. Рассмотрено как гидростатическое сжатие и одноосное сжатие (растяжение) влияет на топологические свойства объема и, соответственно, поверхностную электронную структуру.

4. Впервые было рассмотрено формирование фазы антиферромагнитного топологического изолятора в магнитных соединениях $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4) \cdot (\text{Bi}_2\text{Te}_3)_n$ и $\text{MnSb}_2\text{Te}_4 \cdot (\text{Sb}_2\text{Te}_3)_n$ ($n = 0, 1, 2$). Впервые было найдено, что в тонких плёнках данных соединений индуцируется квантовый аномальный эффект Холла.

5. Впервые установлено формирование одномерных состояний на магнитных доменных стенках в магнитных топологических изоляторах. Учёт данных особенностей электронной структуры позволяет объяснить бесщелевой характер дираковского конуса на поверхности данных материалов.

Теоретическая и практическая значимость. Исследование вносит вклад в современный и активно развивающийся раздел физики конденсированного состояния — спинтронику. Найденные в работе детали электронной структуры магнитных и немагнитных топологических изоляторов, а также полупроводников с расщеплением Рашбы демонстрируют разнообразие физических эффектов, связанных с зонной топологией в данных классах соединений. Получены закономерности для эффективного поиска и исследования материалов с сильным вкладом спин-орбитального взаимодействия для дальнейшего приложения в устройствах спинтроники. Данные закономерности связаны с влиянием состава, типа окончания поверхности, а также с особенностями дисперсии зон и орбитальных вкладов в состояния вблизи уровня Ферми, что также отражается в особенностях зонной топологии соединений. В рамках проделанной работы были разработаны эффективные методы численного расчета электронной структуры поверхностей и магнитных доменных стенок, которые в дальнейшем могут применяться при разработке и исследовании электронного транспорта устройств на основе предложенных в работе материалов.

Полученные результаты исследования могут быть использованы для последующих экспериментов, что позволит исследователям отбирать наиболее подходящие для приложения соединения для их роста и измерения свойств. Также они являются основой при конструировании и химическом синтезе элементов устройств спинтроники: спинового транзистора, спинового фильтра

и квантового компьютера. Предложены условия, связанные с формированием электростатического потенциала и магнитных неоднородностей вблизи границы с вакуумом, которые позволяют сформировать детали электронной структуры для практического приложения исследуемых соединений.

Методология и методы исследования. Поскольку объектом исследования является электронная структура объема и поверхности соединений со значительным спин-орбитальным взаимодействием, исследования были проведены как на основе расчетов из первых принципов в рамках теории функционала электронной плотности, так и с использованием модельного метода сильной связи. Первопринципные теоретические расчеты играют предсказательную роль и позволяют исследовать детали электронного спектра. При этом нахождение многочастичных поправок в электронную структуру является способом, позволяющим выработать эмпирические правила ее корректного описания при сравнении с имеющимися экспериментальными данными. Основные первопринципные расчеты проводились в рамках метода проекционных присоединенных волн, реализованного в программном пакете VASP и ABINIT. Данный метод является эффективным при проведении теоретических исследований электронной структуры, что обусловлено как оптимальным соотношением точности и ресурсоемкости расчетов, так и его широким применением при исследованиях электронной структуры топологических соединений. Также в работе применялись и другие методы такие как метод присоединенных плоских волн (код ELK и FLEUR), а также метод линейной комбинации псевдоатомных орбиталей. Первый позволяет наиболее точно получать детали электронной структуры, тогда как второй позволяет исследовать системы, содержащих большее число атомов.

В работе применялся модельный подход в рамках метода сильной связи, что позволило исследовать низкоэнергетическую электронную структуру поверхности топологических изоляторов и полупроводников с расщеплением Рашбы. Применялось два варианта метода. Первый основан на использовании первопринципных расчетов для получения волновых функций Кона-Шэма в качестве основы для дальнейшего проецирования исходного базиса в компактный базис метода сильной связи (код Wannier90). Такой подход позволяет исследовать полубесконечные поверхности на основе рекурсивного метода функций Грина, а также зонную топологию объемных соединений. Другой применяемый в работе

подход — регуляризация гамильтониана в рамках kr -метода, что позволяет получить наиболее простую модель, характеризующую важные для исследования аспекты электронной структуры.

На защиту выносятся следующие положения:

1. В отличие от тривиальных полупроводников в топологических изоляторах многочастичные поправки в рамках GW-приближения приводят к уменьшению величины запрещённой щели в области инвертирования и смещению дна зоны проводимости ближе к центру зоны Бриллюэна, что сказывается на спектре поверхностных дираковских состояний. В ряду соединений $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{X}$ ($\text{X}=\text{Te}, \text{Se}, \text{S}$) в случае $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{S}$ точка Дирака поверхностных состояний изолирована от спектра объёмных состояний, а величина запрещённой щели является наибольшей и составляет порядка 0.4 эВ.

2. В рашбовском полупроводнике BiTeI , принадлежащем к семейству соединений BiTeX ($\text{X}=\text{I}, \text{Cl}, \text{Br}$), за счёт гидростатического сжатия формируется переход в фазу топологического изолятора, причём данный переход происходит через фазу вейлевского полуметалла, реализующуюся в конечном интервале давлений. Данная особенность BiTeI является следствием наименьшей величины запрещённой щели в данном ряду материалов.

3. В периодических гетероструктурах на основе слоёв BiTeX и бислоев висмута (Bi_2TeX , Bi_3TeX ; $\text{X}=\text{I}, \text{Br}$) реализуются топологически нетривиальные фазы. Bi_2TeX принадлежат к классу слабых топологических изоляторов, в которых поверхностные состояния защищены как симметрией по отношению к обращению времени, так и зеркальной симметрией решетки. Соединения Bi_3TeX являются топологическими металлами.

4. Под воздействием одноосного сжатия в трёхмерных топологических полуметаллах KNa_2Bi , K_3Bi и Rb_3Bi происходит топологический фазовый переход в фазу дираковского полуметалла, тогда как при одноосном растяжении формируется фаза топологического изолятора.

5. Соединения $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4) \cdot (\text{Bi}_2\text{Te}_3)_n$ и $(\text{MnSb}_2\text{Te}_4) \cdot (\text{Sb}_2\text{Te}_3)_n$ ($n=0,1,2$) являются антиферромагнитными топологическими изоляторами. В тонких пленках MnBi_2Te_4 и MnSb_2Te_4 реализуется фаза квантового аномального эффекта Холла.

6. На поверхности как магнитных топологических изоляторов, так и магнитно допированных рашбовских изоляторов на магнитных доменных стенках

в обменной щели образуются одномерные топологические состояния. В случае топологических изоляторов данные состояния являются источником квантового характера поперечной проводимости в результате приложения продольной разности потенциалов в области поверхности. В случае магнитно допированных рашбовских полупроводников квантования поперечной проводимости не происходит вследствие значительного кинетического вклада в дисперсию состояний Рашбы.

Степень достоверности полученных результатов обеспечивается использованием современных и проверенных методов расчета, согласием полученных результатов с результатами экспериментальных работ, а также исследований, проведенных другими научными коллективами; качественным согласием результатов, полученных разными методами, между собой.

Публикации. По теме диссертации опубликовано 22 работы, в том числе 20 статей в журналах, включенных в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук и 2 публикации в сборниках материалов международных научных конференций.

Апробация результатов. Основные результаты диссертации докладывались на следующих конференциях: New Trends in Topological Insulators 2015 (Сан-Себастьян, Испания, 2015 г.); Joint Conference of New Trends in Topological Insulators and 17th International Conference on Narrow Gap Systems (Вюрсбург, Германия, 2016 г.); New Trends in Topological Insulators 2017 (Монте Верита, Швейцария, 2017 г.); XXII Уральская международная зимняя школа по физике полупроводников (Екатеринбург, Россия, 2018 г.); Электронные, спиновые и квантовые процессы в молекулярных и кристаллических системах (Уфа, Россия, 2019 г.); Международная конференция «Физическая мезомеханика. Материалы с многоуровневой иерархически организованной структурой и интеллектуальные производственные технологии» (Томск, Россия, 2021); Международная конференция «Физическая мезомеханика материалов. Физические принципы формирования многоуровневой структуры и механизмы нелинейного поведения» (Томск, Россия, 2022).

Личный вклад автора. Содержание диссертации и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные

работы. Автором сделан определяющий вклад при постановке решаемых задач, разработке путей и методов их решения, проведении непосредственных расчетов, совместном обсуждении и интерпретации полученных результатов. Все представленные в диссертации результаты получены лично автором.

В перечне публикаций другие соавторы выполняли изучения отдельных аспектов свойств материалов, являющихся дополнительными исследованиями, которые не входят в представляемую на защиту диссертацию. И. Ю. Складнева, Р. Хейд, К.-П. Бонен в рамках теории функционала плотности исследовали фононные спектры и динамическую стабильность в работах [2,4,6]. Т. В. Меньщикова в работах [8,9,11,16,19,20] выполняла поиск кристаллической структуры в базах данных соединений, определяла ячейку Ниггли, проводила релаксацию атомных позиций и параметров структуры в рамках первопринципных расчётов с использованием различных схем учёта слабого межатомного взаимодействия. П. Голуб в работах [11,19] исследовал перенос заряда в рамках схемы Бадера на основе рассмотрения натуральных орбиталей связи. Н. Л. Зайцев в работе [20] исследовал электронные свойства гетероструктур на основе MnBi_2Te_4 ($\text{MnBi}_2\text{Te}_4/\text{BiTeI}$). В.Н. Меньшов в работах [18,22] исследовал пространственные характеристики состояний магнитной доменной стенки в рамках кр-приближения и метода огибающей. Е.К. Петров в работе [6] производил релаксацию атомных позиций соединений KNa_2Bi , K_3Bi и Rb_3Bi . М. Отроков, А. Эрнст, Ф. Хоффман, М. Бланко-Рэй и А. Ю. Вязовская в работах [13,14,15,17] исследовали магнитные свойства соединений, а именно величину обменных интегралов, величину магнитных моментов, критическую температуру магнитного перехода, магнитную анизотропию. С. В. Еремеев, Ю. М. Коротеев и М. Г. Вергниори в работах [3,5,10,13,14,15,17] проводили релаксацию кристаллической структуры, а также расчеты электронной структуры поверхностей на основе теории функционала плотности при использовании различных приближений для обменно-корреляционного функционала. Остальные соавторы являются представителями экспериментальных групп, занимающихся синтезом, ростом, а также измерением физико-химических, магнитных и электронных свойств выращенных материалов.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, семи глав, заключения, списка сокращений и списка использованной литературы. Полный

объем диссертации составляет 272 страницы, включая 84 рисунка и 15 таблиц. Список литературы содержит 433 наименования.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность исследуемой проблемы, сформулирована цель работы, поставлены задачи. Представлены методология и методы исследования, защищаемые положения, научная новизна полученных результатов, их достоверность, теоретическая и практическая значимость.

В первой главе представлен обзор основных исследований, внёсших вклад в обнаружение и объяснение наиболее примечательных физических свойств материалов со значительным вкладом спин-орбитального взаимодействия в электронную структуру: рашбовских систем и топологических изоляторов. Главная особенность данных материалов заключается в формировании вблизи уровня Ферми спин-поляризованных состояний, что способствует их применению в устройствах спинтроники, например, в качестве элементов спинового фильтра или спинового транзистора. Рассмотрены основные типы и примеры топологических изоляторов: от наиболее простых, где защита поверхностных состояний осуществляется симметрией по обращению времени, до недавно открытых классов, когда защита осуществляется за счёт зеркальной симметрии решётки или комбинации симметрии обращения времени и полувещей трансляций.

Во второй главе изложены результаты исследования спектров соединений $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{X}$ ($\text{X}=\text{Te}, \text{Se}, \text{S}$) как в рамках теории функционала плотности, так и при использовании квазичастичных поправок на основе GW -приближения. Данные соединения характеризуются слоистым характером кристаллической структуры, состоящей из периодической последовательности пятислойных блоков, разделённых промежутком со слабыми связями Ван Дер Ваальса (Рисунок 1.а). В случае тройных соединений центральные атомы в блоке формируются изоэлектронными элементами группы халькогенов X .

В работе была рассмотрена электронная структура $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{X}$ в рамках теории функционала плотности. Было получено, что она имеет полупроводниковый характер с прямой запрещенной щелью (Рисунки 1.б,в). Экстремумы краёв запрещённой щели расположены на плоскости отражения, т.е. вне центра зоны Бриллюэна. Данное расположение экстремумов является признаком

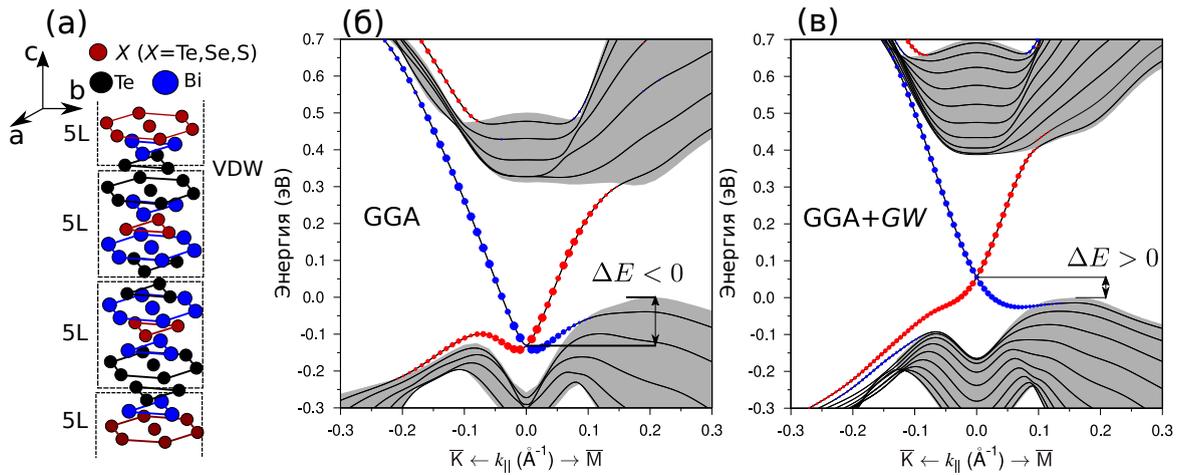


Рисунок 1 – (а) Кристаллическая структура $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{X}$ ($X = \text{Te, Se, S}$). Дополнительно отмечены пятислойные блоки и промежуток Ван Дер Ваальса (VDW). (б) Электронная структура поверхности $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{S}$, рассчитанная при использовании (б) GGA и (в) GGA+GW методов. Параметр ΔE является разностью между точкой Дирака и вершиной валентной зоны. Синим и красным цветом отмечены знак спиновой поляризации поверхностных состояний. Серый цвет — проекция объёмных состояний. Нулевой уровень энергии — уровень Ферми.

формирования области инвертирования краёв запрещённой щели, что также указывает на принадлежность соединений к классу трёхмерных топологических изоляторов. Топологические свойства электронной структуры также подтвердились ненулевым значением \mathbb{Z}_2 -инварианта для всех исследуемых соединений. Топологический инвариант был найден на основе рассмотрения четностей волновых функций в занятой части электронного спектра. В работе было детально проанализирована локализация экстремумов состояний краёв запрещённой щели и её сравнение с имеющимися экспериментальными данными. Данный анализ показывает, что в рамках теории функционала плотности не воспроизводятся полученные в эксперименте детали дисперсии дна зоны проводимости. Также для всех рассмотренных соединений в рамках данной теории имеет место недооценка величины запрещённой щели по сравнению с экспериментом.

Далее были найдены многочастичные поправки к электронной структуре, полученной в рамках теории функционала плотности. Они не меняют полупроводниковый характер электронного спектра $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{X}$, однако значительно модифицируют детали дисперсии состояний краёв запрещённой щели. Так, с учетом данных поправок в области инвертирования, находящейся вблизи центра

зоны Бриллюэна, величина запрещённой щели уменьшается тогда как вне данной области, наоборот, возрастает. При этом дно зоны проводимости смещается ближе к центру зоны Бриллюэна на Γ -Z направление. Описанные поправки отличают топологические изоляторы от известных полупроводников с малым вкладом спин-орбитального взаимодействия в электронной структуре, в которых учет многочастичных эффектов приводит к сдвигу зоны проводимости вверх по энергии. В целом, для рассматриваемых соединений GW -приближение дает непрямую энергетическую щель в спектре квазичастиц, расчетная величина которой находится в очень хорошем согласии с доступными экспериментальными данными.

Наиболее подходящим для практического приложения из рассматриваемого ряда является соединение $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{S}$, характеризующееся наибольшей запрещённой щелью величиной 0.41 эВ. Исследование поверхностной электронной структуры данного соединения (см. Рисунок 1.в) свидетельствует, что квазичастичные поправки приводят к её значительной перестройке в окрестности уровня Ферми. Это выражается в смещении положения точки Дирака выше по энергии относительно края валентной зоны в центре зоны Бриллюэна. При этом точка Дирака формируется выше вершины валентной зоны ($\Delta E > 0$). Описанные особенности $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{S}$, полученные в рамках теории, подтвердились экспериментально на основе фотоэмиссии с угловым разрешением.

Указанный характер дисперсии поверхностных топологических состояний в $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{S}$, когда точка Дирака лежит выше вершины валентной зоны ($\Delta E \approx 40$ мэВ), свидетельствует о возможности приложения данного соединения в качестве компонента устройств квантовых вычислений. Осаждение дополнительного слоя сверхпроводника на поверхность $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{S}$ приводит к индуцированию сверхпроводящей запрещённой щели в области энергий вблизи точки Дирака. При этом в отличие от структурных аналогов Bi_2Te_3 и $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$, сверхпроводящая щель в $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{S}$ изолирована от спектра объёмных состояний и является источником таких экзотических частиц как фермионы Майораны. На основе данных состояний возможна реализация квантовых вычислений в устройствах на основе гетероструктуры топологический изолятор-сверхпроводник.

Исследование занятой части зонного спектра $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{S}$ в широком интервале энергии свидетельствуют о наличии ряда спин-поляризованных

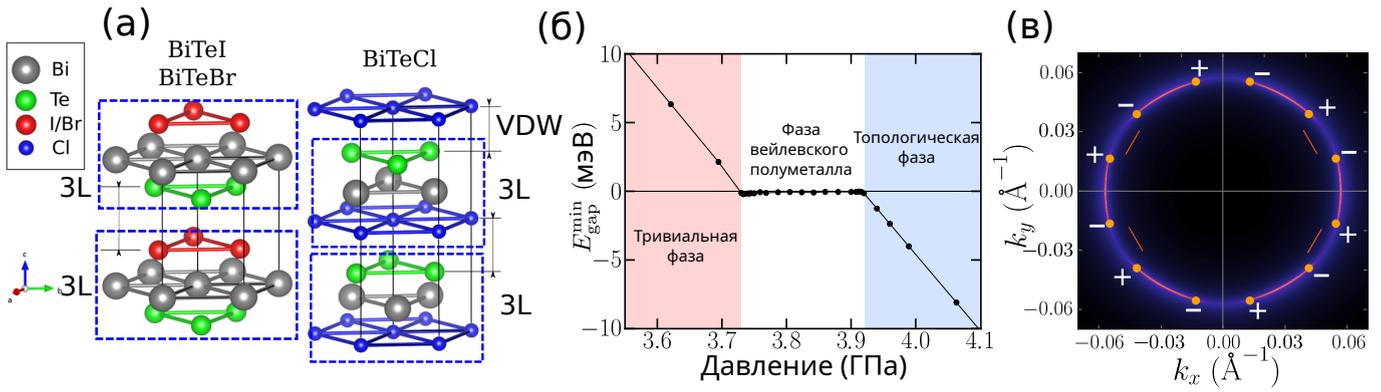


Рисунок 2 – (а) Кристаллическая структура BiTeX ($X = \text{Te, Se, S}$).

Дополнительно отмечены трехслойные блоки, образующие соединение, а также промежуток Ван Дер Ваальса (VDW). (б) Минимальная запрещённая зона в области давлений топологического фазового перехода в случае соединения BiTeI .

(в) Изоэнергетический контур на уровне Ферми поверхностной электронной структуры соединения BiTeI при давлении 3.84 ГПа в случае Te-окончания.

Положение точек Вейля отражено оранжевыми точками. Дополнительно отражен знак топологического заряда.

состояний, которые имеют топологическую природу вследствие инвертирования локальных запрещенных щелей, внутри которых формируется их локализация. Теоретические спектры хорошо согласуются с экспериментом как на уровне теории функционала плотности, так и в рамках GW -приближения. Можно заключить, что исследование занятой области спектра в широком интервале энергий возможно с использованием наиболее выгодной с вычислительной точки зрения теории функционала плотности.

В третьей главе представлено исследование электронной структуры теллуругалогенидов висмута Bi_nTeX ($X = \text{I, Cl, Br}$; $n = 1$). Данные соединения представляют собой периодическую последовательность трехслойных блоков, разделенных слабыми силами Ван Дер Ваальса (Рисунок 2.а). В отличие от рассмотренных в главе 2 топологических изоляторов, рассматриваемые в данной главе соединения обладают полярным характером химической связи вследствие инверсионной симметрии кристалла.

В диссертации были рассмотрены спектры данных соединений как в рамках теории функционала электронной плотности, так и при использовании многочастичных поправок в рамках GW -приближения. Было показано, что учёт многочастичных поправок к объёмной зонной структуре, полученная в рамках теории функционала плотности, ведёт к модификации параметров Рашбы для дна зоны проводимости, а также улучшают согласие по величине запрещённой

щели с экспериментом. Следует заметить, что данная величина чувствительна к выбору обменно-корреляционного функционала на этапе исследования в рамках теории функционала плотности. Так, выбор приближения локальной плотности позволяет получить наибольшее согласие с экспериментом. В случае BiTeI значения параметров Рашбы для дна зоны проводимости, которые получены с учётом многочастичных поправок, менее согласуются с экспериментом в отличие от полученных на уровне теории функционала плотности. Подобное расхождение свидетельствует, что в рамках GW -приближения состояния, рассматриваемые в рамках фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением, являются поверхностными состояниями. На основе полученных значений параметров расщепления объёмных спектров была предложена оценка параметров Рашбы для поверхностных состояний. В случае соединений BiTeI и BiTeCl данная оценка приводит к согласию полученных значений с экспериментом.

Вследствие наличия связи параметров Рашбы с величиной запрещённой щели для BiTeI было предположено возможность возникновения топологического фазового перехода под действием гидростатического сжатия. Однако экспериментальные исследования касаются возможности данного перехода оказались противоречивыми. В данной главе излагаются его теоретическое исследование на основе сопоставления давлений топологического и кристаллического фазовых переходов для всех трех соединений BiTeX . Результаты исследований подтвердили возникновение топологического перехода в соединении BiTeI при давлении 3.7 ГПа (см. Рисунок 1.б), а кристаллического — 6.5 ГПа. Таким образом, можно сделать вывод, что в данном соединении топологический переход возможен и данный результат подтверждается рядом экспериментальных исследований. Для родственных соединений BiTeBr и BiTeCl вывод о возможности топологического перехода является отрицательным. Так, в соединении BiTeBr кристаллический переход происходит при меньших давлениях, чем топологический. В соединении BiTeCl топологический переход не наблюдался вследствие металлизации электронной структуры при увеличении давления. Также было показано, что излагаемые закономерности и заключения не зависят от выбора приближения для обменно-корреляционного функционала и напрямую связаны со свойствами исследуемых соединений при нормальных условиях. Так, величина запрещённой щели в соединении BiTeI является

минимальной и составляет ~ 0.4 эВ. В BiTeBr и BiTeCl она выше и равняется ~ 0.6 эВ и ~ 0.8 эВ, соответственно.

В главе излагаются детали исследования топологического перехода в соединении BiTeI . Данный переход происходит через металлическую фазу вейлевского полуметалла в области давлений 3.7–3.9 ГПа (см. Рисунок 1.б). Данная фаза характеризуется касанием валентной и проводящей части спектра в точках Вейля (см. Рисунок 1.в). Пары данных точек обладают противоположным топологическим зарядом, что выражается в формировании поверхностных состояний арок Ферми, которые соединяют данные пары, в электронной структуре поверхности. По мере роста давления происходит смещение точек Вейля по часовой или против часовой стрелки вблизи верхней плоскости трёхмерной зоны Бриллюэна. При этом направление смещения также зависит от знака топологического заряда данных точек.

В четвёртой главе представлены результаты исследований электронной структуры гомологического ряда соединений Bi_nTeX ($X=\text{I,Br}$; $n = 2, 3$). Соединения Bi_2TeX ($n = 2$) являются периодической последовательностью двух трёхслойных блоков BiTeX ($X=\text{I,Br}$) и бислоя висмута, связанных слабыми взаимодействиями Ван Дер Ваальса (Рисунок 3.а). Отметим, что в отличие от соединений BiTeX ($n = 1$) в данных соединениях два трёхслойных блока ориентированы друг относительно друга таким образом, что в целом структура является симметричной относительно операции пространственной инверсии. Соединения Bi_3TeX ($n = 3$) характеризуются периодической последовательностью трёхслойного блока BiTeX и бислоя висмута.

Прежде всего была рассмотрена как объёмная электронная структура соединений Bi_2TeX ($n = 2$), так и спектры всех возможных окончаний поверхности (001), являющейся естественной плоскостью скола. На основе исследования четностей волновых функций в занятой части спектра в главе было показано, что соединение Bi_2TeX ($X=\text{I,Br}$) является слабым топологическим изолятором и классифицируется топологическим инвариантом $\mathbb{Z}_2 = (0; 0, 0, 1)$. Топологические свойства формируются вследствие вклада спин орбитального взаимодействия и симметрии по обращению времени. Данное значение инварианта состоит из так называемого сильного индекса равного нулю (первое значение в последовательности) и трёх слабых индексов равных (0,0,1). Согласно \mathbb{Z}_2 -классификации значение слабых индексов свидетельствуют, что на естественной

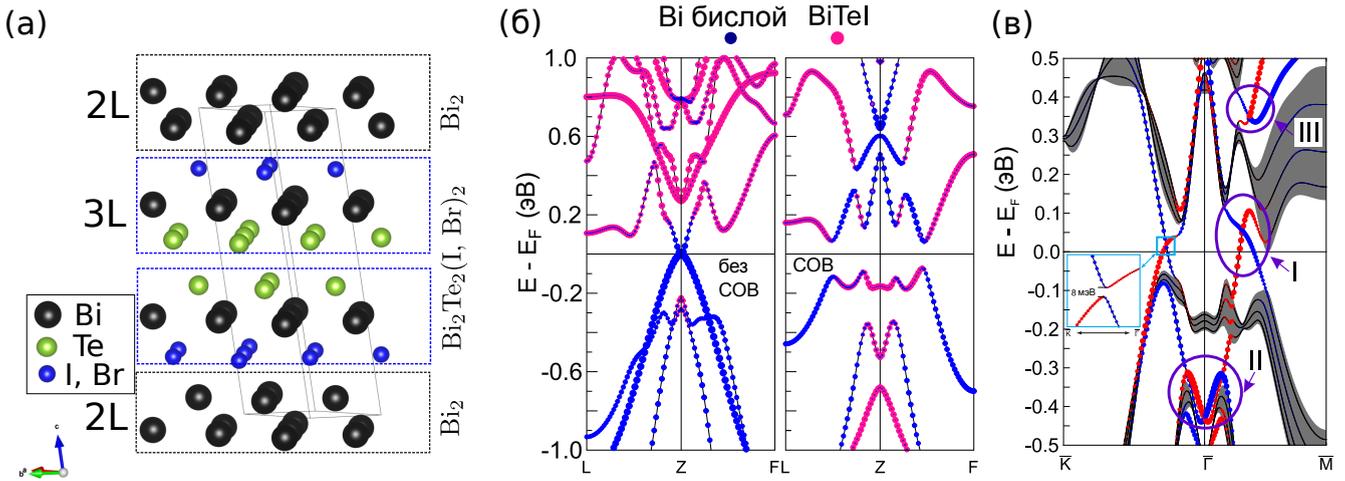


Рисунок 3 – (а) Кристаллическая структура Bi_2TeX ($X = \text{I, Br}$). (б) Объёмная электронная структура Bi_2TeI , рассчитанная без учёта спин-орбитального взаимодействия и с его учётом. Розовый и синий цвет отражает вклад состояний $[\text{Bi-Te-I}]$ блоков и $[\text{Bi}_2]$ атомных блоков в спектр, соответственно. (в) Электронная структура Te -окончания (001) поверхности Bi_2TeI (чёрные линии) и проекция объёмных состояний на двумерную ЗБ (серые области). Фиолетовые овалы отражают бесщелевые поверхностные состояния в (I) глобальной запрещённой щели и (II, III) локальных запрещённых щелях валентной и проводящей областях спектра. Вставка отображает малое расщепление поверхностного состояния вдоль $\bar{\Gamma}-\bar{K}$ -направления двумерной зоны Бриллюэна

поверхности скола не должно наблюдаться каких-либо топологических состояний. Тогда как на боковых поверхностях формируется пара топологических состояний, защищённых симметрией по обращению времени.

В полном соответствии с топологической классификацией, полученной на основе чётности волновых функций, объёмная электронная структура характеризуется инвертированием состояний краёв запрещённой щели (см. рисунок 3.б). При этом инверсия имеет место не только в центре зоны Бриллюэна, но и в точке Z , что и приводит к так называемой слабой топологии Bi_2TeX . В отличие от ранее известных топологических изоляторов указанная инверсия описывается вкладом состояний, которые принадлежат различным Ван Дер Ваальсовским блокам, а именно $[\text{Bi}_2]$ и $[\text{BiTeX}]_2$ -фрагментам кристаллической структуры. Кроме этого, в инвертирование вовлечены не пара зон вблизи уровня Ферми, а две пары зон ближайших к данному уровню на шкале энергии, что приводит к формированию дополнительных запрещённых щелей со смешанным характером вкладов.

В рамках проведённых первопринципных исследований электронной структуры всех возможных окончаний поверхности скола впервые было продемонстрировано формирование бесщелевого характера дисперсии топологических поверхностных состояний (см. Рисунок 3.в для случая Te-окончания), что противоречит \mathbb{Z}_2 -классификации топологических изоляторов. Противоречие возникает вследствие того, что данная классификация не учитывает пространственные симметрии, которые могут приводить к топологической защите поверхностных состояний. В данном случае такая защита обеспечивается зеркальной симметрией решётки.

Также была рассмотрена электронная структура в случае I/Br- и Bi-окончания поверхности. В данном случае сохраняется наличие бесщелевого состояния, но точки вырождения топологического состояния (точки Дирака) смещаются вниз (I/Br-окончание) и вверх по энергии (Bi-окончание). Отметим, что электронная структура в указанных окончаниях может рассматриваться как электростатическое возмущение поверхностной электронной структуры Te-окончания за счёт эффекта изгиба зон, что и приводит к смещению точек Дирака. Важной особенностью электронного спектра в случае I/Br-окончания также является индуцирование дополнительного состояния Рашбы вследствие полярности ближайшего к вакууму блока BiTeX.

Дальнейшее увеличение содержания висмута приводит к формированию соединений Bi_3TeX ($X=\text{I,Br}$). Они являются металлическими системами, зонная топология которых позволяет их отнести к классу сильных топологических изоляторов ($\mathbb{Z}_2 = (1; 0, 0, 0)$). Таким образом, на поверхности данных систем формируется защищённый симметрией по обращению времени конус Дирака, который расположен в локальной запрещённой щели в области уровня Ферми. Такая ситуация соответствует формированию выделенных каналов проводимости на поверхности без рассеяния носителей заряда в объём соединения. В работе были проанализированы различные окончания поверхности в случае естественной плоскости скола. Для всех вариантов окончания было выявлено образование топологического поверхностного состояния в локальной запрещённой щели вблизи уровня Ферми, что также подтверждает топологическую природу данных соединений.

В пятой главе представлено исследование электронной структуры и наиболее примечательных аспектов химической связи соединений KNa_2Bi ,

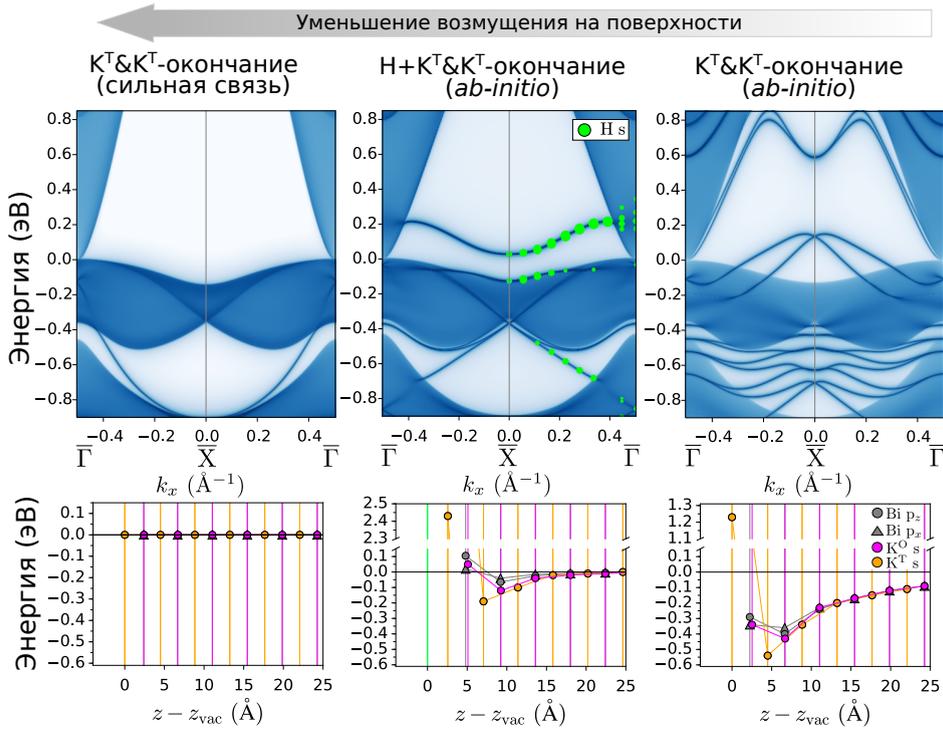


Рисунок 4 – Верхние панели: Поверхностные спектральные функции соединения K_3Bi вдоль направления $\bar{\Gamma}-\bar{X}-\bar{\Gamma}$ в случае $\text{K}^{\text{T}}\&\text{K}^{\text{T}}$ -окончания (модель сильной связи, левые панели), $\text{K}^{\text{T}}\&\text{K}^{\text{T}}$ -окончания с дополнительным адслоем водорода [$\text{H}+\text{K}^{\text{T}}\&\text{K}^{\text{T}}$ -окончание] (теория функционала плотности, центральные панели) и $\text{K}^{\text{T}}\&\text{K}^{\text{T}}$ -окончания (теория функционала плотности, правые панели). В случае $\text{H}+\text{K}^{\text{T}}\&\text{K}^{\text{T}}$ -окончания (центральная панель) вклады s-орбиталей водорода отмечены зелеными кружками в правой части панели. Нижние панели: поверхностный вклад в диагональные элементы Гамильтониана (H_{α}^{surf}) для каждого рассматриваемого случая

K_3Bi и Rb_3Bi . Показано, что данные соединения являются топологическими изоляторами, что напрямую связано с особенностями дисперсии объемных состояний вблизи уровня Ферми. Данный вывод также подтверждается исследованием электронной структуры при последовательном улучшении учёта обменно-корреляционного взаимодействия с применением гибридных приближений или MetaGGA приближения для обменно-корреляционного функционала.

Отдельно рассматривалась поверхностная электронная структура. Демонстрируется, что на (001) поверхностях данных соединений формируются тривиальные поверхностные состояния вследствие электростатических эффектов в области границы с вакуумом, что провоцирует перераспределение заряда и реконструкцию электронной плотности вблизи поверхности. Данные состояния не индуцируются при исследовании в рамках метода сильной связи, которое

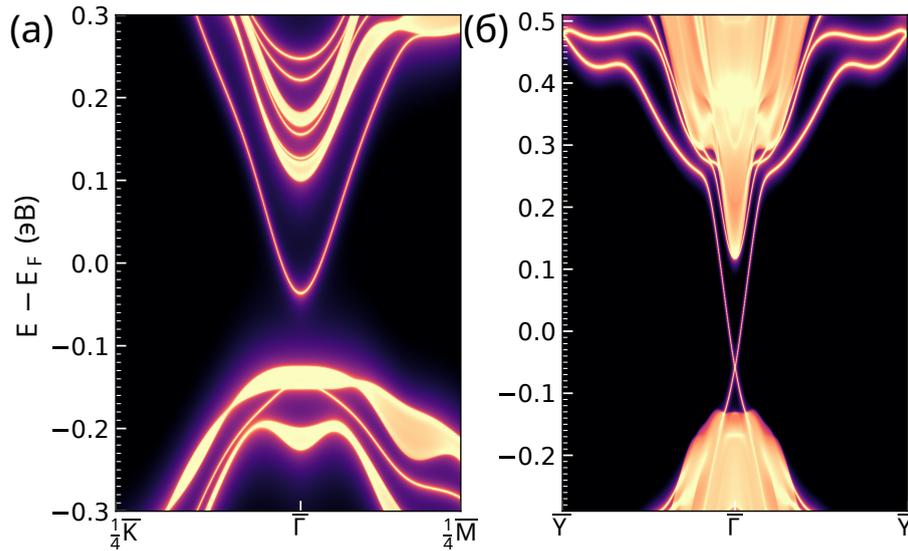


Рисунок 5 – Электронная структура MnBi_2Te_4 . (а) (001) поверхность и (б) (100) поверхность

не учитывает эффекты вблизи границы с вакуумом. При этом дисперсия топологического поверхностного состояния изменяется от простой конусообразной формы, получаемой на основе моделей сильной связи, до последовательности связанных зон со слабой дисперсией в случае учёта эффекта изгиба зон вблизи поверхности в рамках теории функционала плотности (см. Рисунок 4).

Рассмотрение влияния гидростатического сжатия на электронные свойства KNa_2Vi выявило индуцирование топологического фазового перехода в фазу тривиального полупроводника в ходе данного возмущения. При значении сжатия, соответствующем топологическому переходу, электронная структура соединения характеризуется фазой дираковского полуметалла с формированием единственного конуса Дирака. Тривиальная фаза характеризуется наличием последовательности зон в точке Γ , которые не образуют инвертированный характер запрещённой щели.

Нарушение кубической симметрии за счёт одноосного сжатия индуцирует топологический фазовый переход в две различные фазы. При одноосном расширении соединение становится трёхмерным дираковским полуметаллом с парой конусов Дирака вдоль Γ -Z направления ЗБ. Это, в свою очередь, формирует на боковых поверхностях состояния арки Ферми. С другой стороны, одноосное сжатие ведёт к формированию фазы топологического изолятора.

В шестой главе представлено исследование электронной структуры гомологических рядов соединений $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4) \cdot (\text{Bi}_2\text{Te}_3)_n$ и $(\text{MnSb}_2\text{Te}_4) \cdot (\text{Sb}_2\text{Te}_3)_n$.

Результаты исследования электронной структуры и топологических свойств свидетельствуют, что MnBi_2Te_4 ($n = 1$) является первым примером антиферромагнитного топологического изолятора. При этом на (001) поверхности топологическое поверхностное состояние является щелевым и не защищено какими-либо симметриями, а на боковых поверхностях оно защищено $T\tau_{1/2}$ симметрией (T — симметрия по обращению времени, $\tau_{1/2}$ — смещение на половину ячейки вдоль направления вне плоскости) [см. Рисунок 5]. В двумерном пределе MnBi_2Te_4 демонстрирует уникальный набор топологических переходов в зависимости от толщины плёнки, а также формирование состояний квантового аномального эффекта Холла и нулевого плато квантового аномального эффекта Холла. Рассмотрение электронной структуры соединений $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot (\text{Bi}_2\text{Te}_3)_n$, являющихся естественными гетероструктурами на основе атомных блоков MnBi_2Te_4 и Bi_2Te_3 , показало, что при $n = 1, 2$ (MnBi_4Te_7 , $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$) соединения также как и MnBi_2Te_4 ($n = 0$) являются антиферромагнитными ТИ, а при $n = 3$ ($\text{MnBi}_8\text{Te}_{13}$) ферромагнитным изолятором. При бóльших значениях n межплоскостное обменное взаимодействие становится слабым, что приводит к формированию фрустрированного магнетизма.

Также было предсказано существование семейства магнитных топологических изоляторов в ряду Ван дер Ваальсовых слоистых соединений $(\text{MnSb}_2\text{Te}_4) \cdot (\text{Sb}_2\text{Te}_3)_n$. Так, материалы MnSb_2Te_4 ($n = 0$), MnSb_4Te_7 ($n = 1$) и $\text{MnSb}_6\text{Te}_{10}$ ($n = 2$) являются антиферромагнитными топологическими изоляторами. При $n \geq 3$ (т.е. от $\text{MnSb}_8\text{Te}_{13}$ и далее) образуется фаза магнитного топологического изолятора, в которой намагниченности двумерных слоев Mn структурных блоков MnSb_2Te_4 разупорядочены вдоль [001] направления. Наконец, в двумерном пределе пленки MnSb_2Te_4 демонстрируют ряд топологически нетривиальных состояний, среди которых состояние квантового аномального эффекта Холла.

В седьмой главе изложены результаты исследования спектроскопических свойств электронных систем, содержащих спин-поляризованные состояния Дирака и Рашбы, в случае формирования различного типа магнитных неоднородностей: одиночной магнитной доменной стенки, пары и периодической последовательности магнитных доменных стенок. Указанные особенности формируют портрет низкоэнергетического электронного спектра, который качественно отличающийся от такового в случае однородного намагничивания.

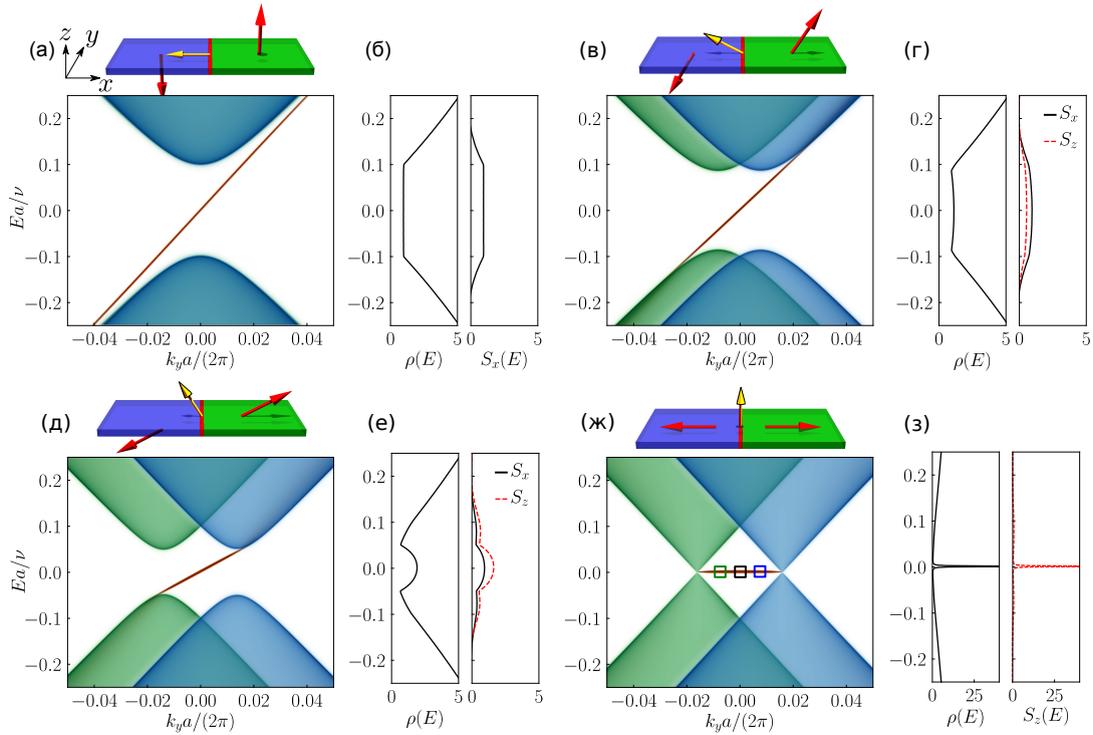


Рисунок 6 – Связанные электронные состояния, которые индуцированы изолированной МДС с резким изменением направления магнитного момента в пространстве при увеличении угла θ . Панели (а,б), (в,г), (д,е), (ж,з) соответствуют $\theta = 0, \pi/6, \pi/3, \pi/2$, соответственно. Проекции двумерных состояний конусов Дирака при $x < 0$ (синий цвет) и $x > 0$ (зелёный цвет). На панели (а) дисперсия двух проекций совпадает. Красным цветом отображается дисперсия связанного состояния, локализованного на МДС. Также на рисунке отражены суммарная ПЭС ($\rho(E)$) и разрешённая по спину ПЭС ($S_i(E)$) [панели (б), (г), (е), (з)]. Также на рисунках над панели отражены конфигурации МДС. Здесь жёлтыми стрелочками представлено направление вклада спинового момента связанного состояния

Показано, что данные неоднородности приводят к образованию низкоразмерных связанных состояний на границах магнитных доменов, которые обладают различными свойствами в зависимости от особенностей образующейся конфигурации магнитной текстуры (см. рисунок 6).

В случае дираковского спектра и лёгкой оси намагниченности вне плоскости результаты численного исследования поверхностной электронной структуры для рассмотренных конфигураций магнитных доменных стенок позволяют объяснить имеющиеся противоречия в результатах спектроскопических экспериментов, в которых наблюдается отсутствие формирования обменной запрещённой щели топологических поверхностных состояний. Полученные результаты указывают,

что формирование бесщелевого конуса является следствием наложения указанных низкоразмерных состояний, локализованных на границах магнитных доменов.

Представленные в данной главе результаты также свидетельствуют о возможности управления групповой скоростью и направлением спиновой поляризации связанных состояний доменных стенок за счёт изменения лёгкой оси намагниченности при использовании, например, внешнего некантующего магнитного поля. Это может быть полезным при конструировании приборов спинтроники на основе связанных состояний, ответственных за формирование квантованной поперечной проводимости. Возможность управления групповой скоростью связанных состояний на границах магнитных доменов приводит к возможности индуцировать киральные бездисперсные состояния с нулевой энергией в случае конфигурации лёгкой оси намагничивания в плоскости.

В случае двумерных электронных систем на основе спин-орбитального расщепления Рашбы индуцирование магнитных неоднородностей приводит к формированию более сложного характера электронного спектра. В таких системах границы магнитных доменов также содержат поляризованные по спину одномерные связанные состояния вследствие образования зонной топологии. Однако такие состояния не являются стабильными, что определяется соотношением кинетического, спин-орбитального и магнитного вкладов в спектр двумерных состояний Рашбы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Для слоистых топологических изоляторов $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{X}$ ($\text{X}=\text{Te}, \text{Se}, \text{S}$) в рамках первопринципных методов было исследовано влияние квазичастичных поправок на дисперсию состояний краев запрещенной щели. Фундаментальная щель квазичастичного спектра минимальна в случае соединения Bi_2Te_3 ($E_g = 0.15$ эВ), тогда как в соединении $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$ она в ~ 2.2 раза больше. Расчет электронной структуры в рамках теории функционала плотности, так и квазичастичного спектра $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{S}$ свидетельствует об усилении модификации состояний краев запрещенной щели при замене слоя центрального халькогена на более легкий в ряду соединений $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{X}$ ($\text{X}=\text{Te}, \text{Se}, \text{S}$). В целом, для рассматриваемых соединений квазичастичные поправки приводят к непрямой энергетической щели, расчетная величина которой находится в очень хорошем согласии с доступными экспериментальными данными.

2. В теллуругалогенидах висмута Bi_nTeX ($X=\text{I}, \text{Br}, \text{Cl}; n = 1$) квазичастичные поправки в рамках GW-приближения к спектру, полученному в рамках теории функционала плотности, приводят к заметному уменьшению величины расщепления Рашбы и увеличению ширины запрещенной энергетической щели. Для соединения BiTeI данные результаты свидетельствуют против интерпретации экспериментально наблюдаемых состояний как состояний, имеющих «объемную» природу. Метод оценки значений параметров Рашбы для поверхностных состояний обеспечивает хорошее согласие с экспериментальными данными. В случае BiTeCl экспериментальные данные не воспроизводятся на уровне теории функционала плотности, тогда как предложенный метод восстанавливает согласие с экспериментом.

3. Рассмотрение влияния гидростатического сжатия на объемную электронную структуру рашбовских полупроводников Bi_nTeX ($X=\text{I}, \text{Cl}, \text{Br}; n = 1$) свидетельствует о формировании топологического фазового перехода в соединении BiTeI в области давлений 3.7–3.9 ГПа. Данный переход сопровождается формированием фазы вейлевского полуметалла в конечном интервале давлений, которая характеризуется бесщелевым характером электронного спектра с касанием валентной зоны и зоны проводимости в точках Вейля. Указанные особенности электронной структуры объемного соединения приводят к формированию на его поверхности состояний арок Ферми, соединяющие в спектре точки Вейля.

4. Рассмотрение топологических свойств ряда Bi_nTeX ($X=\text{I}, \text{Br}; n = 2, 3$), образующих периодическую последовательность на основе трехслойных блоков BiTeX и бислоев висмута, показало, что соединения Bi_nTeX ($X=\text{I}, \text{Br}; n = 2$) являются слабыми топологическими изоляторами и классифицируются значениями топологических индексов $\mathbb{Z}_2 = (0; 0, 0, 1)$. При этом расчеты всех возможных окончаний естественной поверхности скола (001) продемонстрировали сохранение бесщелевого характера дисперсии поверхностных состояний вследствие наличия зеркальной симметрией решетки. Это свидетельствует, что данные соединения имеют двойственную природу зонной топологии, поскольку принадлежат как к классу слабых, так и «кристаллиновых» топологических изоляторов. Соединения Bi_nTeX ($X=\text{I}, \text{Br}; n = 3$) являются топологическими металлами, характеризуясь формированием топологических поверхностных состояний в локальной запрещенной щели. Таким образом, увеличение

содержания атома висмута в ряду Bi_nTeX ($n = 1, 2, 3$) свидетельствует, что по мере увеличения содержания атома висмута от соединения к соединению происходит формирование нетривиальной топологии электронной структуры от фазы топологического тривиального полупроводника [Bi_nTeX ($n = 1$)] к фазе сильного топологического изолятора [Bi_nTeX ($n = 3$)] через фазу слабого топологического изолятора [Bi_nTeX ($n = 2$)]. При этом данный процесс сопровождается усилением металлического характера электронного спектра.

5. Рассмотрена электронная структура соединений KNa_2Bi , K_3Bi и Rb_3Bi . С применением первопринципных методов исследования демонстрируется формирование на поверхности данных соединений как тривиальных, так и топологических поверхностных состояний. Было показано, что образование тривиальных состояний происходит вследствие эффекта изгиба зон, поскольку соединения характеризуются полярным характером химической связи. Исследование зонной топологии данных соединений свидетельствует, что они относятся к классу топологических изоляторов. При этом дисперсия топологического поверхностного состояния изменяется от простой конусообразной формы в рамках модели сильной связи, до последовательности связанных зон со слабой дисперсией, получаемых в рамках первопринципных расчетов. Рассмотрение влияния гидростатического сжатия на электронные свойства KNa_2Bi выявило индуцирование топологического фазового перехода в фазу тривиального полупроводника. При значении сжатия, соответствующем топологическому переходу, электронная структура соединения характеризуется фазой дираковского полуметалла с формированием единственного конуса с точкой Дирака в центре зоны Бриллюэна. Нарушение кубической симметрии за счет одноосного сжатия индуцирует топологический фазовый переход в две различные фазы. При одноосном расширении соединение становится трехмерным дираковским полуметаллом с парой конусов Дирака вдоль Γ - Z направления зоны Бриллюэна. Это, в свою очередь, формирует на боковых поверхностях состояния арок Ферми. С другой стороны, одноосное сжатие индуцирует фазу сильного топологического изолятора с ненулевой глобальной запрещённой щелью.

6. Исследование электронных свойств семейств соединений $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot (\text{Bi}_2\text{Te}_3)_n$ ($\text{MnSb}_2\text{Te}_4 \cdot (\text{Sb}_2\text{Te}_3)_n$) выявило, что соединения MnBi_2Te_4 , MnBi_4Te_7 , $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$, MnSb_2Te_4 , MnSb_4Te_7 и $\text{MnSb}_6\text{Te}_{10}$ являются антиферромагнитными топологическими изоляторами. При этом в тонких пленках соединений MnBi_2Te_4

и MnSb_2Te_4 имеет место индуцирование топологических переходов при изменении толщины пленки, а также формирование состояний квантового аномального эффекта Холла и квантового аномального эффекта Холла в нулевом плато.

7. Исследование особенностей электронной структуры магнитных топологических изоляторов при формировании на их поверхности магнитных доменов показало, что в таких системах на границах доменов формируются низкоразмерные связанные состояния, соединяющие проекции двумерных конусов Дирака на одномерную зону Бриллюэна. Групповая скорость данных состояний связана с направлением их спиновой поляризации и зависит от направления легкой оси намагничивания в области границы с вакуумом. Формирование данных особенностей объясняет ряд спектроскопических экспериментов, связанных с формированием бесщелевого конуса Дирака в магнитных топологических изоляторах.

Дальнейшие исследования могут быть посвящены изучению тонких квантовых эффектов в тонких пленках магнитных топологических изоляторах и рашбовских полупроводниках при индуцировании в них магнитных доменных стенок.

Представленная диссертационная работа выполнялась в рамках ВИУ «Топологические изоляторы со сложной атомной структурой как перспективные материалы для спинтроники» (8.1.05.2015 Л) (2015–2016 гг.), Госзадания «Научные сотрудники, обеспечивающие функционирование научных лабораторий, созданных в рамках правительственной программы «Мегагрантов»» (3.8895.2017/П220) (2017–2019 гг.), гранта РНФ «Управление электронными свойствами топологически нетривиальных фаз» (18-12-00169) (2018–2022 гг.), Госзадания «Разработка теории квантовых процессов и явлений в физике высоких энергий и физике конденсированного состояния» (FSWM-2020-0033) (2020–2024 гг.), гранта Лаборатории электронной и спиновой структуры наносистем СПбГУ (грант №94031444 в 2023 г.) (2015–2024 гг.).

СПИСОК РАБОТ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Статьи в научных журналах, индексируемых в международной базе данных Web of Science:

1. I. P. Rusinov, O. E. Tereshchenko, K. A. Kokh, A. R. Shakhmametova, I. A. Azarov, E. V. Chulkov. Role of anisotropy and spin-orbit interaction in the

optical and dielectric properties of BiTeI and BiTeCl compounds // JETP Letters. – 2015. – Vol. 101, is. 8. – P. 507–512.

И. П. Русинов, О. Е. Терещенко, К. А. Кох, А. Р. Шахмаметова, И. А. Азаров, Е. В. Чулков. Роль анизотропии и спин-орбитального взаимодействия в оптических и диэлектрических свойствах соединений BiTeI и BiTeCl // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2015. – Т. 101, вып. 8. – С. 563–568.

2. I. P. Rusinov, T. V. Menshchikova, I. Yu. Sklyadneva, R. Heid, K.-P. Bohnen, E. V. Chulkov. Pressure effects on crystal and electronic structure of bismuth tellurohalides // New Journal of Physics. – 2016. – Vol. 18, № 11 – P. 113003.

3. I. P. Rusinov, T. V. Menshchikova, A. Isaeva, S. V. Eremeev, Yu. M. Koroteev, M. G. Vergniory, P. M. Echenique, E. V. Chulkov. Mirror-symmetry protected non-TRIM surface state in the weak topological insulator Bi₂TeI // Scientific Reports. – 2016. – Vol. 6, № 1 – P. 20734.

4. I. Yu. Sklyadneva, I. P. Rusinov, R. Heid, K.-P. Bohnen, P. M. Echenique, E. V. Chulkov. Pressure-induced topological phases of KNa₂Bi // Scientific Reports. – 2016. – Vol. 6, № 1 – Article number: 24137.

5. S.V. Eremeev, I.P. Rusinov, P.M. Echenique, E.V. Chulkov. Temperature-driven topological quantum phase transitions in a phase-change material Ge₂Sb₂Te₅ // Scientific Reports. – 2016. – Vol. 6. – Article number: 38799.

6. I. P. Rusinov, I. Yu. Sklyadneva, R. Heid, K.-P. Bohnen, E. K. Petrov, Yu. M. Koroteev, P. M. Echenique, E. V. Chulkov. Nontrivial topology of cubic alkali bismuthides // Physical Review B. – 2017. – Vol. 95, № 22. – Article number: 224305.

7. I. I. Klimovskikh, A. M. Shikin, M. M. Otrokov, A. Ernst, I. P. Rusinov, O. E. Tereshchenko, V. A. Golyashov, J. Sanchez-Barriga, A. Yu. Varykhalov, O. Rader, K. A. Kokh, E. V. Chulkov. Giant Magnetic Band Gap in the Rashba-Split Surface State of Vanadium-Doped BiTeI: A Combined Photoemission and Ab Initio Study // Scientific Reports. – 2017. – Vol. 7. – Article number 3353.

8. A. Zeugner, M. Kaiser, P. Schmidt, T. V. Menshchikova, I. P. Rusinov, A. V. Markelov, W. Van den Broek, E. V. Chulkov, T. Doert, M. Ruck, A. Isaeva. Modular Design with 2D Topological-Insulator Building Blocks: Optimized Synthesis and Crystal Growth and Crystal and Electronic Structures of Bi_xTeI (x = 2, 3) // Chemistry of Materials. – 2017. – Vol. 29, № 3 – P. 1321–1337.

9. A. Zeugner, J. Teichert, M. Kaiser, T. V. Menshchikova, I. P. Rusinov, A. V. Markelov, E. V. Chulkov, T. Doert, M. Ruck, A. Isaeva. Synthesis, Crystal and Topological Electronic Structures of New Bismuth Tellurohalides Bi_2TeBr and Bi_3TeBr // *Chemistry of Materials*. – 2018. – Vol. 30, № 15 – P. 5272–5284.

10. E. Annese, T. Okuda, E. F. Schwier, H. Iwasawa, K. Shimada, M. Natamane, M. Taniguchi, I. P. Rusinov, S. V. Eremeev, K. A. Kokh, V. A. Golyashov, O. E. Tereshchenko, E. V. Chulkov, A. Kimura. Electronic and spin structure of the wide-band-gap topological insulator: Nearly stoichiometric $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{S}$ // *Physical Review B*. – 2018. – Vol. 97, № 20. – Article number 205113.

11. I. P. Rusinov, P. Golub, I. Yu. Sklyadneva, A. Isaeva, T. V. Menshchikova, P. M. Echenique, E. V. Chulkov. Chemically driven surface effects in polar intermetallic topological insulators A_3Bi // *Phys. Chem. Chem. Phys.* – 2018. – Vol. 20, № 41 – P. 26372-26385.

12. F. Pabst, D. Hobbis, N. Alzahrani, H. Wang, I. P. Rusinov, E. V. Chulkov, J. Martin, M. Ruck, G. S. Nolas. Transport properties of topologically non-trivial bismuth tellurobromides Bi_nTeBr // *Journal of Applied Physics*. – 2019. – Vol. 126, № 10 – P. 105105.

13. M. M. Otrokov, I. I. Klimovskikh, H. Bentmann, D. Estyunin, A. Zeugner, Z. S. Aliev, S. Gaß, A. U. B. Wolter, A. V. Koroleva, A. M. Shikin, M. Blanco-Rey, M. Hoffmann, I. P. Rusinov, A. Yu. Vyazovskaya, S. V. Eremeev, Yu. M. Koroteev, V. M. Kuznetsov, F. Freyse, J. Sánchez-Barriga, I. R. Amiraslanov, M. B. Babanly, N. T. Mamedov, N. A. Abdullayev, V. N. Zverev, A. Alfonso, V. Kataev, B. Büchner, E. F. Schwier, S. Kumar, A. Kimura, L. Petaccia, G. Di Santo, R. C. Vidal, S. Schatz, K. Kißner, M. Ünzelmann, C. H. Min, Simon Moser, T. R. F. Peixoto, F. Reinert, A. Ernst, P. M. Echenique, A. Isaeva, E. V. Chulkov. Prediction and observation of an antiferromagnetic topological insulator // *Nature*. – 2019. – Vol. 576, № 7787 – P. 416–422.

14. M. M. Otrokov, I. P. Rusinov, M. Blanco-Rey, M. Hoffmann, A. Yu. Vyazovskaya, S. V. Eremeev, A. Ernst, P. M. Echenique, A. Arnau, and E. V. Chulkov. Unique Thickness-Dependent Properties of the van der Waals Interlayer Antiferromagnet MnBi_2Te_4 Films // *Physical Review Letters*. – 2019. – Vol. 122, № 10. – Article number: 107202.

15. I. I. Klimovskikh, M. M. Otrokov, D. Estyunin, S. V. Eremeev, S. O. Filnov, A. Koroleva, E. Shevchenko, V. Voroshnin, A. G. Rybkin, I. P. Rusinov, M. Blanco-

Rey, M. Hoffmann, Z. S. Aliev, M. B. Babanly, I. R. Amiraslanov, N. A. Abdullayev, V. N. Zverev, A. Kimura, O. E. Tereshchenko, K. A. Kokh, L. Petaccia, G. Di Santo, A. Ernst, P. M. Echenique, N. T. Mamedov, A. M. Shikin, E. V. Chulkov. Tunable 3D/2D magnetism in the $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$ topological insulators family // npj Quantum Materials. – 2020. – Vol. 5, № 1. – Article number: 54.

16. M. Nurmamat, K. Okamoto, S. Zhu, T.V. Menshchikova, I.P. Rusinov, V.O. Korostelev, K. Miyamoto, T. Okuda, T. Miyashita, X. Wang, Y. Ishida, K. Sumida, Eike F. Schwier, M. Ye, Z.S. Aliev, M.B. Babanly, I.R. Amiraslanov, E.V. Chulkov, K.A. Kokh, O.E. Tereshchenko, K. Shimada, S. Shin, A. Kimura. Topologically Nontrivial Phase-Change Compound GeSb_2Te_4 // ACS Nano.– 2020. – 14, № 7. – P. 9059-9065.

17. S. V. Ereemeev, I. P. Rusinov, Yu. M. Koroteev, A. Yu. Vyazovskaya, M. Hoffmann, P. M. Echenique, A. Ernst, M. M. Otrokov, E. V. Chulkov. Topological Magnetic Materials of the $(\text{MnSb}_2\text{Te}_4) \cdot (\text{Sb}_2\text{Te}_3)_n$ van der Waals Compounds Family // The Journal of Physical Chemistry Letters. – 2021. – Vol. 12, № 17 – P. 4268-4277.

18. I. P. Rusinov, V. N. Men'shov, E. V. Chulkov. Spectral features of magnetic domain walls on the surface of three-dimensional topological insulators // Physical Review B. – 2021. – Vol. 104, № 3. – Article number: 035411.

19. P. Gebauer, H. Poddig, L. T. Corredor-Bohorquez, T. V. Menshchikova, I. P. Rusinov, P. Golub, F. Caglieris, C. Benndorf, T. Lindemann, E. V. Chulkov, A. U. B. Wolter, B. Büchner, T. Doert, A. Isaeva. Heavy-Atom Antiferromagnet GdBiTe : An Interplay of Magnetism and Topology in a Symmetry-Protected Topological Semimetal // Chemistry of Materials. - 2021. Vol. 33, № 7. - P. 2420-2435.

20. N. L. Zaitsev, I. P. Rusinov, T. V. Menshchikova, E. V. Chulkov. Interplay between exchange-split Dirac and Rashba-type surface states at the $\text{MnBi}_2\text{Te}_4/\text{BiTeI}$ interface // Physical Review B. – 2023. – Vol. 107, № 4. – Article number: 045402.

Публикации в прочих научных изданиях:

21. И.П. Русинов, И.Ю. Складнева, Е.В. Чулков. Электронная структура и топологические свойства соединений KNa_2Bi , K_3Bi , Rb_3Bi , BiTeX ($X=\text{I}, \text{Cl}, \text{Br}$) // Программа и тезисы докладов XXII Уральской международной зимней школы по физике полупроводников. Екатеринбург, 19–24 февраля 2018 г. – Екатеринбург, 2018. – С. 263.

22. И.П. Русинов, В.Н. Меньшов, Е.К. Петров, Е.В. Чулков. Особенности электронных поверхностных состояний в магнитных материалах с сильным

спин-орбитальным взаимодействием // Физическая мезомеханика материалов. Физические принципы формирования многоуровневой структуры и механизмы нелинейного поведения: тезисы докладов международной конференции. Томск, Россия, 5-8 сентября 2022 г. – Новосибирск, 2022. – С. 471.