

Министерство образования и науки Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)
Физический факультет
Кафедра физики металлов

ДОПУСТИТЬ К ПРЕДСТАВЛЕНИЮ ГЭК
Руководитель ООП
к.ф.-м.н., доцент кафедры КЭиФ,
декан ФФФ НИ ТГУ,
Коротаев А.Г. Коротаев
«24» июня 2019 г.

НАУЧНЫЙ ДОКЛАД

об основных результатах подготовленной научно - квалификационной работы
(диссертации)

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ИЗОЛЯТОРОВ И ЭФФЕКТЫ
КВАНТОВАННОЙ ПРОВОДИМОСТИ В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ НА ИХ ОСНОВЕ

по основной образовательной программе подготовки научно-педагогических кадров в
аспирантуре
направление подготовки 01.04.07 - Физика конденсированного состояния

Швец Игорь Анатольевич

Научный руководитель
к.ф.-м.н., с.н.с. ЛНПП ТГУ
Меньшов В.Н. Меньшов
«24» июня 2019 г.
Автор работы _____
аспирант
Швец И.А. Швец

В настоящее время многочисленные исследования в области конденсированного состояния вещества сфокусированы на понимании физики топологических изоляторов и необычных явлений, которые они проявляют: таких как квантовый спиновый эффект Холла и квантовый аномальный эффект Холла и состояние аксионного изолятора [1, 2]. С экспериментальной точки зрения существует ряд проблем, связанных с электронной структурой трехмерных топологических изоляторов Bi_2Te_3 , Bi_2Se_3 , Sb_2Te_3 . Во-первых, выращенные образцы являются полупроводниками n или p типа за счет собственных дефектов кристаллической решетки, что выражается в положении уровня Ферми вне запрещенной зоны. Это шунтирует спин-поляризованные токи, что препятствует практической реализации бездиссипативного транспорта. Во-вторых, в электронном зонном спектре точка Дирака глубоко сдвинута в область объемной валентной зоны, что приводит к дополнительному рассеянию электронов на состояниях объемного континуума. В-третьих, бинарные топологические изоляторы являются узкозонными полупроводниками, в то время как, для использования топологических изоляторов при комнатной температуре запрещенная зона должна составлять более 100 мэВ. В связи с этим активно ведется поиск новых материалов с более подходящими параметрами электронной структуры. Можно выделить следующие стратегии:

- 1) Замена слоев атомов изовалентными аналогами, например, Bi/Sb , Te/Se/S ;
- 2) Введение нового сорта атомов – к примеру, Pb и Ge , и получение трех/четырёх компонентных соединений; $\text{GeBi}_{4-x}\text{Sb}_x\text{Te}_7$
- 3) Синтез твердых растворов нестехиометрического состава, варьирование которого позволяет плавно изменять параметры электронной структуры (ширину запрещенной зоны, положение уровня Ферми). $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$

В рамках данной диссертационной работы были поставлены следующие задачи:

- На основе расчетов из первых принципов в рамках теории функционала электронной плотности определить зависимость параметров электронной зонной структуры, таких как знак и величина объемной запрещенной зоны и положение ее краев, положение точки Дирака топологических поверхностных состояний относительно уровня Ферми от состава для ряда соединений ($\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$, $\text{PbBi}_2\text{Te}_{4-x}\text{Se}_x$). Провести сравнительный анализ полученных теоретических результатов с известными экспериментальными данными.
- В рамках аналитического подхода изучить влияние границы раздела (интерфейса) и краев, а также размерного эффекта на транспортные свойства полупроводниковых гетероструктур, в которых тонкая пленка топологического изолятора находится между обкладками тривиального изолятора.

- Исследовать спин-зависимые транспортные свойства в гетероструктурах, состоящих из пленки топологического изолятора (ТИ) и ферромагнитного нормального изолятора (ФМНИ). Для трехслойной модели ФМНИ/ТИ/ФМНИ изучить влияние эффект магнитной близости на интерфейсе ТИ/ФМНИ на холловский отклик системы.

В литературе показано, что изменение концентрации примеси x в четырех-компонентном нестехиометрическом соединении $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$ приводит к сдвигу точки Дирака относительно уровня Ферми и позволяет локализовать уровень Ферми вблизи конуса Дирака. В частности, для соединений с $x = 0.5$, $y = 1.2 - 1.3$ обнаружено наибольшее значение объемного сопротивления. Они характеризуются положением уровня Ферми и точки Дирака внутри запрещенной зоны и не испытывают влияния объемных зарядов. Проведенные расчеты из первых принципов показали, что величина запрещенной зоны составляет примерно 250 мэВ, в то время как ARPES эксперимент демонстрирует значение ~ 300 мэВ. Изучение эффекта разупорядочения атомов в подрешетке Te/Se показало, что конфигурация, в которой атомы Te локализованы во внешних слоях 5-слойного блока, является энергетически более выгодной, и при этом расчетный электронный спектр лучшим образом согласуется с экспериментальным.

Еще одним перспективным кандидатом для практического применения является система $\text{PbBi}_2\text{Te}_{4-x}\text{Se}_x$. В рамках теории функционала электронной плотности было исследовано влияние концентрации атомов селена x на электронную структуру и спиновую текстуру соединений этой системы. Теоретически показано, что при всех выбранных значениях концентрации x эти соединения являются топологическими изоляторами, а при высоком содержании селена обладают широкой запрещенной зоной и изолированной от объемных состояний точкой Дирака. Увеличение концентрации селена приводит к уширению запрещенной зоны с 80 до 300 мэВ, росту значения групповой скорости носителей заряда и уменьшению области локализации поверхностного состояния в приповерхностном слое пленки.

В рамках исследования экспериментальной научной группой были выращены образцы состава $\text{PbBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$ ($x = 2.0$) и $\text{PbBi}_2\text{Te}_{1.4}\text{Se}_{2.6}$ ($x = 2.6$) вертикальным методом Бриджмена и проведено исследование их электронной структуры методами фотоэмиссионной спектроскопии. Для изучения эффекта беспорядка для концентраций, соответствующих полученным образцам, были рассмотрены различные конфигурации элементарной ячейки, и определено наиболее вероятное распределение по узлам кристаллической решетки. Сравнение теоретических и экспериментальных результатов

показало, что для выращенных соединений наши расчеты лучше воспроизводят фотоэмиссионные данные в случае, когда атомы теллура располагаются во внешних слоях семислойного блока.

Таким образом, на основе расчетов из первых принципов можно изучить топологические характеристики слоистых материалов. Однако этот подход имеет ограничение на количество атомов в расчётной ячейке (~100 атомов), что затрудняет изучение гетероструктур больших размеров и краевых эффектов. Для описания транспортных характеристик, интерфейсных эффектов, и таких эффектов как квантовый спиновый и квантовый аномальный эффекты Холла широко используются континуальные модели [3,4]. В таких моделях кристаллическая структура, химический состав, упорядочивание атомов по узлам решетки, являющиеся обязательными в первопринципных расчетах, эффективно входят в параметры модели, что облегчает задачу, однако при этом теряется конкретизация и в дальнейшем требуется согласование модельных параметров с параметрами реальных материалов.

Создание полупроводниковых гетероструктур, содержащих тонкие пленки трехмерного топологического изолятора (3D ТИ), находящимся между обкладками тривиального (нормального) изолятором (НИ), является перспективным направлением для спинтронных приложений. Благодаря особенностям электронного строения объема 3D ТИ в таких гетероструктурах на интерфейсах ТИ/НИ возникают нетривиальные электронные состояния, которые характеризуются почти линейной зависимостью энергии от импульса в объемной запрещенной зоне и связью между направлениями спина и импульса. Когда пленка ТИ настолько тонкая, что электронные состояния, возникающие на ее противоположных интерфейсах ТИ/НИ, перекрываются, в спектре открывается гибридная щель. В ряде работ было показано, что переход между фазами квантового спин-холловского изолятора и тривиального изолятора происходит за счет смены знака гибридной щели, связанной с изменением толщины пленки. В тоже время описание граничных эффектов, что принципиально в случае гетероструктур ТИ/НИ, является далеко неполным.

В работе изучено влияние интерфейсов и краев пленки ТИ, а также ее толщины, на транспортные свойства гетероструктур ТИ/НИ, в которых тонкая пленка 3D ТИ находится между обкладками тривиального изолятора. В рамках континуальной модели для трехслойной структуры НИ/ТИ/НИ выявлено, что дисперсия, профиль огибающей волновой функции, кривизна Берри электронных состояний принципиально зависят как от толщины пленки, так и от величины интерфейсного потенциала. Варьируя эти параметры, можно менять топологические свойства системы. Расчет спин-холловского отклика для

бесконечной в плоскости интерфейса трехслойной структуры НИ/ТИ/НИ показал, что можно реализовать серию переходов между топологической и тривиальной фазами, варьируя толщину пленки и интерфейсный потенциал. Построена соответствующая фазовая диаграмма для трехслойной структуры. Для определения влияния краевых эффектов была использована модель полубесконечной в плоскости интерфейса гетероструктуры, которая позволяет описать спектр и пространственное поведение краевых состояний, и определить условия их существования. Обнаружено, что наличие или отсутствие краевых состояний в пределах гибридационной щели не связано однозначно с тем фактом, находится ли пленка в топологической или тривиальной фазе.

В рамках изучения квантового аномального эффекта Холла проведено теоретическое изучение спин-зависимых транспортных свойств в гетероструктурах, содержащих тонкие пленки топологических изоляторов (ТИ) и ферромагнитных нормальных изоляторов (ФМНИ). На основе континуального подхода для трехслойной модели ФМНИ/ТИ/ФМНИ было изучено, как на интерфейсе ФМНИ/ТИ эффект магнитной близости влияет на холловский отклик системы. Предсказано, что система ФМНИ/ТИ/ФМНИ испытывает фазовый переход в фазу квантового аномального эффекта Холла из топологически тривиальной фазы или фазы квантового спинового эффекта Холла, что контролируется обменным полем, вызванным эффектом близости; толщиной пленки ТИ и параметрами зонной структуры ТИ. Были построены соответствующие фазовые диаграммы модели ФМНИ/ТИ/ФМНИ. Полученные результаты могут оказаться полезными с точки зрения поиска подходящих материалов для формирования гетероструктур, проявляющих квантовый спиновый и квантовый аномальный эффект Холла.

Результаты исследований опубликованы в 7 статьях, индексируемых в Web of Science и Scopus (Physical Review B, Surface Science, Materials Chemistry and Physics, Journal of Magnetism and Magnetic Materials), и представлены на 5 конференциях.

Все представленные результаты получены при непосредственном участии автора. Исследования проводились с использованием оборудования Межрегионального суперкомпьютерного центра Национального исследовательского Томского государственного университета.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Chang C.-Z. al. Experimental observation of the quantum anomalous Hall effect in a magnetic topological insulator, Science 340, 167 (2013).

2. Katmis F., et al. A high-temperature ferromagnetic topological insulating phase by proximity coupling, *Nature* 533, 513 (2016).
3. Bernevig B. A., Hughes T. L., and Zhang S.-C. Quantum spin hall effect and topological phase transition in HgTe quantum wells, *Science* 314, 1757 (2006).
4. Zhang H., Liu C.-X., Qi X.-L., Dai X., Fang Z. & Zhang S.-C. Topological insulators in Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 and Sb_2Te_3 with a single Dirac cone on the surface *Nature Physics* 5, 438–442 (2009).

Отчет о проверке на заимствования №1



Автор: shvets_ia@mail.ru / ID: 1616368

Проверяющий: (shvets_ia@mail.ru / ID: 1616368)

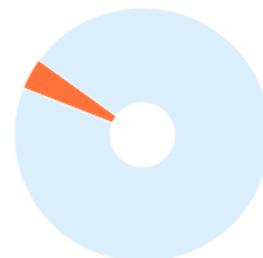
Отчет предоставлен сервисом «Антиплагиат»- <http://users.antiplagiat.ru>

ИНФОРМАЦИЯ О ДОКУМЕНТЕ

№ документа: 3
 Начало загрузки: 27.06.2019 15:00:29
 Длительность загрузки: 00:00:00
 Имя исходного файла: Научный доклад_Швец_финал
 Размер текста: 102 кБ
 Символов в тексте: 10518
 Слов в тексте: 1293
 Число предложений: 62

ИНФОРМАЦИЯ ОБ ОТЧЕТЕ

Последний готовый отчет (ред.)
 Начало проверки: 27.06.2019 15:00:30
 Длительность проверки: 00:00:00
 Комментарии: не указано
 Модули поиска: Модуль поиска Интернет



ЗАИМСТВОВАНИЯ	ЦИТИРОВАНИЯ	ОРИГИНАЛЬНОСТЬ
4,29%	0%	95,71%

Заимствования — доля всех найденных текстовых пересечений, за исключением тех, которые система отнесла к цитированиям, по отношению к общему объему документа.
 Цитирования — доля текстовых пересечений, которые не являются авторскими, но система посчитала их использование корректным, по отношению к общему объему документа. Сюда относятся оформленные по ГОСТу цитаты; общеупотребительные выражения; фрагменты текста, найденные в источниках из коллекций нормативно-правовой документации.

Текстовое пересечение — фрагмент текста проверяемого документа, совпадающий или почти совпадающий с фрагментом текста источника.

Источник — документ, проиндексированный в системе и содержащийся в модуле поиска, по которому проводится проверка.

Оригинальность — доля фрагментов текста проверяемого документа, не обнаруженных ни в одном источнике, по которым шла проверка, по отношению к общему объему документа.

Заимствования, цитирования и оригинальность являются отдельными показателями и в сумме дают 100%, что соответствует всему тексту проверяемого документа.

Обращаем Ваше внимание, что система находит текстовые пересечения проверяемого документа с проиндексированными в системе текстовыми источниками. При этом система является вспомогательным инструментом, определение корректности и правомерности заимствований или цитирований, а также авторства текстовых фрагментов проверяемого документа остается в компетенции проверяющего.

№	Доля в отчете	Доля в тексте	Источник	Ссылка	Актуален на	Модуль поиска	Блоков в отчете	Блоков в тексте
[01]	3,45%	3,45%	Two dimensional photonic qu...	http://arxiv.org	26 Мар 2017	Модуль поиска Интернет	3	3
[02]	0,84%	2,16%	https://esu.citis.ru/ikrbs/31f4...	https://esu.citis.ru	20 Мар 2018	Модуль поиска Интернет	2	3
[03]	0%	1,51%	J5zPvZZjg0.pdf	https://disser.spbu.ru	26 Сен 2017	Модуль поиска Интернет	0	3