

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ



Национальный исследовательский
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

**Сборник материалов
XVI Российской научной
студенческой конференции**

Томск, 17–20 апреля 2018 г.



ТОМСК
«Издательство НТЛ»
2018

Антиферромагнитный топологический изолятор $\text{MnBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$

Е.К. Петров

Томский государственный университет, г. Томск

Последнее десятилетие в физике конденсированного состояния знаменуется значительным интересом к топологически нетривиальным фазам. Особенно актуальными в этой области являются исследования, направленные на поиск и изучение материалов, в которых возможна реализация квантового аномального эффекта Холла. Такие материалы являются потенциальной основой новой электроники, более быстродействующей и энерго-сберегающей. Одним из классов топологически нетривиальных материалов являются топологические изоляторы (ТИ) [1]. Отличительными особенностями ТИ являются наличие симметрии обращения времени и сильного спин-орбитального взаимодействия.

В 2010 г. была предложена концепция антиферромагнитного (АФМ) ТИ [2]: особой антиферромагнитно упорядоченной топологически нетривиальной фазы, в которой в силу АФМ упорядочения трансляционная симметрия и симметрия обращения времени нарушена, но сохраняется их комбинация (произведение). В объеме такого кристалла наличие АФМ-упорядочения не приводит к возникновению каких-либо значительных отличий от фазы ТИ, однако приводит к возникновению ряда интересных эффектов на поверхности.

На текущий момент в опубликованных работах упоминается всего лишь один кандидат на роль АФМ ТИ – GdBiPt [3, 4]. В настоящей работе предложено соединение, обладающее описанными выше признаками АФМ ТИ – $\text{MnBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$, и проведено первопринципное исследование кристаллической структура, магнитного упорядочения, магнитной анизотропии и электронной структуры объема и поверхности этого соединения. Расчеты проведены в рамках теории функционала электронной плотности методом проекционных плоских волн, реализованным в программном пакете VASP.

Как показало сравнение полных энергий $\text{MnBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$ в ромбоэдрической и моноклинной фазах, энергия последней выше на 225 мэВ на формульную единицу. Следовательно, $\text{MnBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$ кристаллизуется в ромбоэдрической кристаллической решетке (рис. 1, *a*). Рассчитанные значения параметров решетки составили $a_{\text{rhom}} = 13,30 \text{ \AA}$, $\alpha = 18,12^\circ$ или $a_{\text{hex}} = 4,19 \text{ \AA}$, $c_{\text{hex}} = 39,24 \text{ \AA}$.

Аналогичным образом путем сравнения полных энергий было установлено, что $\text{MnBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$ характеризуется АФМ-упорядочением, при этом ось квантования спина лежит в плоскости (0001). Стоит отметить, что в плос-

кости (0001) магнитная анизотропия отсутствует. Отдельного внимания заслуживает то, что описанный тип магнитной анизотропии в $\text{MnBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$ реализуется исключительно за счет диполь-дипольного взаимодействия. Без учета диполь-дипольного вклада энергетически выгодной является ось квантования спина [0001].

Зонная структура объема $\text{MnBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$ (рис. 1, б) типична для полупроводников и имеет непрямую энергетическую щель порядка 250 мэВ. Анализ орбитального состава краев энергетической щели показывает, что она является инвертированной. К аналогичному результату приводит расчет Z_2 -инварианта и анализ зонной структуры при различных значениях константы спин-орбитального взаимодействия. Таким образом, $\text{MnBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$ является АФМ ТИ.

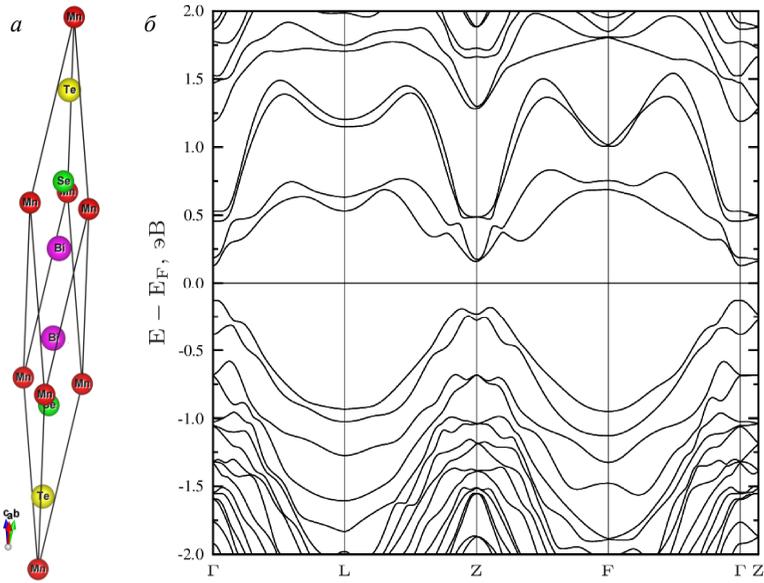


Рис. 1. Элементарная ячейка $\text{MnBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$ в ромбоэдрической кристаллической структуре (а); зонная структура объема $\text{MnBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$ (б)

Прямым следствием наличия инвертированной энергетической щели в объеме $\text{MnBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$ является наличие бесщелевых поверхностных состояний. В силу того, что $\text{MnBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$ намагничен в плоскости (0001), эти состояния не разрушаются, и точка Дирака смещается в направлении, перпендикулярном оси квантования спина.

Образование и эволюция поверхностных состояний можно проследить, изучая зонную структуру тонких пленок различной толщины (рис. 2). Видно, что бесщелевое поверхностное состояние начинает формироваться при толщине пленки в 5SL и формируется окончательно при 7SL.

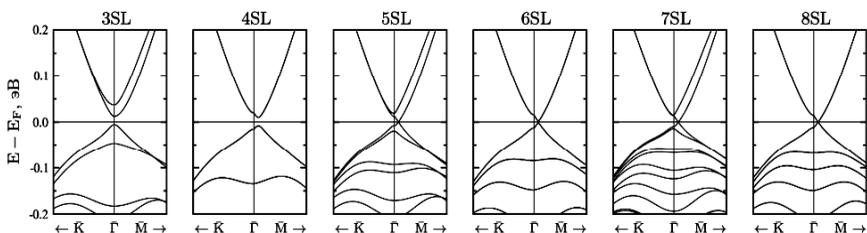


Рис. 2. Зонные структуры тонких пленок $\text{MnBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$ в окрестности точки $\bar{\Gamma}$ при различной толщине. Сверху указана толщина пленки в семислойных блоках (3SL – три семислойных блока, 4SL – четыре и т.д.)

Полученные в настоящей работе результаты свидетельствуют о том, что $\text{MnBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$ является АФМ ТИ. Однако в силу того, что ось квантования спина в этом материала лежит в плоскости (0001), реализация квантового аномального эффекта Холла в этом материале не представляется возможной. Тем не менее полученные результаты представляют интерес для дальнейших исследований свойств материалов этого класса.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Hasan M.Z., Kane C.L.* Colloquium: Topological insulators // *Reviews of Modern Physics*. – 2010. – V. 82. – No. 4. – P. 3045.
2. *Mong R.S.K., Essin A.M., Moore J.E.* Antiferromagnetic topological insulators // *Physical Review B*. – 2010. – V. 81. – No. 24. – P. 245209.
3. *Müller R.A. et al.* Magnetic structure of GdBiPt: A candidate antiferromagnetic topological insulator // *Physical Review B*. – 2014. – V. 90. – No. 4. – P. 041109.
4. *Li Z. et al.* Electronic structure of the antiferromagnetic topological insulator candidate GdBiPt // *Physical Review B*. – 2015. – V. 91. – No. 23. – P. 235128.

Petrov E.K. Antiferromagnetic topological insulator $\text{MnBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$

Петров Евгений Константинович, аспирант; eg901petrov@gmail.com