

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

# Изучение гетероструктур на основе магнитных и топологических изоляторов

Т.В. Безрядина

*Томский государственный университет, г. Томск*

Одной из практически важных задач физики твердого тела является снижение диссипативных потерь энергии при протекании электрического тока через образец, или поиск таких материалов, в которых потери энергии, вызванные рассеянием электронов, сведены к минимуму. Шагом навстречу решению данной проблемы является изучение топологически нетривиальных материалов, в частности двумерных и трёхмерных топологических изоляторов.

Топологические изоляторы – это соединения, имеющие в объеме инвертированную энергетическую щель, а на поверхности – бесщелевые проводящие состояния [1, 2]. Отличительной особенностью поверхностных состояний топологических изоляторов является то, что электроны в таких состояниях защищены от рассеяния назад симметрией обращения времени. В таких системах возможна реализация квантового эффекта Холла и квантового аномального эффекта Холла [3]. Квантовый эффект Холла проявляется в квантовании холловского сопротивления в квазидвумерном электронном газе в сильных магнитных полях, а квантовый аномальный эффект Холла является его разновидностью, реализующейся при отсутствии внешнего магнитного поля при наличии собственной намагниченности [4]. При КЭХ и КАЭХ продольное сопротивление, то есть сопротивление вдоль направления распространения тока обращается в нуль, это говорит о том, что электроны движутся без рассеяния [5].

Квантовый аномальный эффект Холла может наблюдаться при допировании топологических изоляторов магнитными примесями, приводящими к формированию щелевого топологического состояния [6]. Другим способом организовать обменное расщепление в топологическом состоянии является формирование двумерных магнитных материалов на поверхности топологических изоляторов. В работе [7] было показано, что осаждение монослоя MnSe на поверхность слоистого топологического изолятора, селенида висмута, приводит к его диффузии внутрь слоя и формированию атомно-упорядоченной двумерной магнитной фазы. В рамках данной работы рассмотрен выявленный механизм формирования гетероструктур магнитный изолятор/топологический изолятор на основе других магнитных элементов. Были изучены электронные и спиновые структуры тонкопленочных вандер-ваальсовых гетероструктур на основе топологических изоляторов типа

селенида висмута и двумерных магнитных материалов на основе хрома и ванадия, которые могут формироваться за счет диффузии магнитных атомов и атомов халькогена в приповерхностный слой топологического изолятора, формируя упорядоченную структуру. Кроме того, также были рассмотрены гетероструктуры на основе топологического изолятора и дихалькогенида ванадия.

Исследования проводились методами функционала электронной плотности при помощи первопринципного кода VASP. Были получены равновесные параметры решеток и позиций атомов в элементарной ячейке, а также рассчитаны зонные структуры объемных фаз VSe, VSe<sub>2</sub> и CrSe и их тонких пленок для равновесных параметров решетки и параметров гетероструктуры. В методе линейного отклика самосогласованным образом получены значения хаббардовских поправок для учета сильных корреляций локализованных *d*-электронов магнитных атомов [8]. На основе расчетов полной энергии гетероструктур дан положительный ответ на вопрос о возможности диффундирования магнитных атомов в центр топологического изолятора. Получены энергетические спектры гетероструктур (см. рис. 1 и 2).

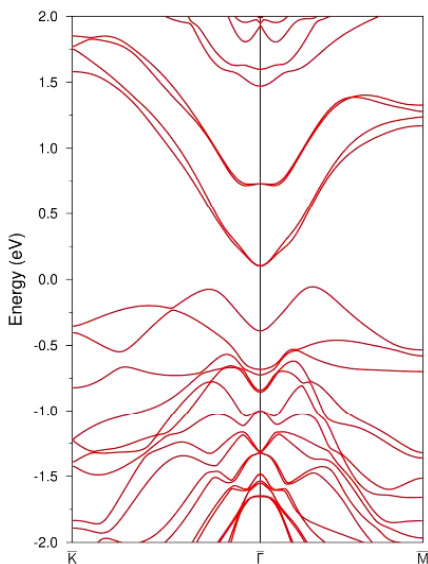


Рис. 1. VBi<sub>2</sub>Se<sub>4</sub>SL

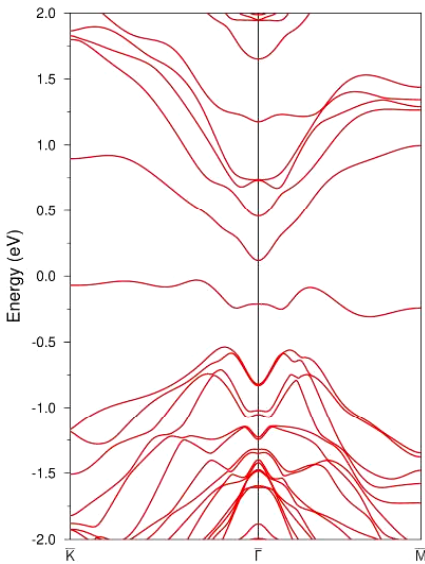


Рис. 2. CrBi<sub>2</sub>Se<sub>4</sub>SL

## ЛИТЕРАТУРА

1. *Hasan M.Z.* Colloquium: topological insulators // *Reviews of Modern Physics*. – 2010. – V. 82. – No. 4. – P. 3045.
2. *Kane C.L.* Z<sub>2</sub> topological order and the quantum spin Hall Effect // *Physical Review Letters*. – 2005. – V. 95. – No. 14. – P. 146802.
3. *Кибис О.В.* Квантовый эффект Холла // *Соросовский образовательный журнал*. –1999. – Вып. 9. – С. 89–93.
4. *Yu R. et al.* Quantized anomalous Hall effect in magnetic topological insulators // *Science*. – 2010. – V. 329. – No. 5987. – P. 61–64.
5. *Liu C.X.* The Quantum Anomalous Hall Effect: Theory and Experiment // *Annual Review of Condensed Matter Physics*. – 2016. – V. 7. – P. 301–321.
6. *Chang C.Z.* Experimental observation of the quantum anomalous Hall effect in a magnetic topological insulator // *Science*. – 2013. – V. 340. – P. 167–170.
7. *Hirahara T.* Large-Gap Magnetic Topological Heterostructure Formed by Subsurface Incorporation of a Ferromagnetic Layer // *NanoLetters*. – 2017. – V. 8. – No. 17. – P. 3493–3500.
8. *Cococcioni M.* Linear response approach to the calculation of the effective interaction parameters in the LDA+U method // *Physical Review*. – 2005. – V. 71. – No. 035105. – P. 035105–1 – 035105–16.

---

**Bezryadina T.V.** The study of heterostructures based on magnetic and topological insulators

**Безрядина** Татьяна Владимировна, студентка; [tatiana.bezryadina@gmail.com](mailto:tatiana.bezryadina@gmail.com)