

Fazy topologiczne supersieci 3D i materiałów 2D : modelowanie teoretyczne

Egzotyczna fizyka faz topologicznych, takich jak izolatory topologiczne (TI), topologiczne izolatory krystaliczne (TCI), kwantowe spinowe izolatory Halla (QSHI), semimetały Diraca (DM), semimetały Weyla (WSM) i semimetały typu „nodal line” (NDLSM) stała się ostatnimi czasy przedmiotem szeroko zakrojonych badań teoretycznych i eksperymentalnych. W większości przypadków symetrie odgrywają ważną rolę w ochronie faz topologicznych, a jedną z najprostszych i najbardziej fundamentalnych z nich jest symetria względem odwrócenia czasu (TRS). Symetria TRS jest łamana przez indukowanie magnetyzmu poprzez domieszkowanie magnetyczne i tworzenie heterostruktury magnetycznej. Materiały topologiczne pozbawione TRS mogą wykazywać magnetyczne fazy topologiczne, takie jak antyferromagnetyczne izolatory topologiczne, magnetyczne semimetały Weyla, Diraca i „nodal line” oraz kwantowe anomalne fazy Halla. Trudno jest jednak znaleźć rzeczywiste materiały, w których mogą realizować się egzotyczne stany topologiczne. Postęp nanonauki i nanotechnologii, a także komercjalizacja zastosowań, takich jak spintronika kwantowa i komunikacja kwantowa, wymaga prac nad odkryciem nowych materiałów wykazujących egzotyczne zachowania.

W poszukiwaniu nowych kandydatów, w których mogą zachodzić egzotyczne zjawiska kwantowe, niniejsza praca koncentruje się przede wszystkim na dwóch różnych klasach materiałów:

(i) **Fazy topologiczne w supersieciach 3D opartych na HgTe** : Używamy symulacji ab initio do badania ewolucji faz topologicznych w zależności od ciśnienia hydrostatycznego i odkształcenia jednoosiowego w dwóch typach supersieci : HgTe / CdTe i HgTe / HgSe, poszukując materiałów z trójwymiarową płaską dyspersją pasmową. W krótkookresowych HgTe / CdTe odkryto izoenergetyczne linie węzłowe supersieci, które mogą zawierać trójwymiarowe płaskie pasma wywołane odkształceniem na poziomie Fermiego bez domieszkowania. Na diagramie fazowym krótkookresowych HgTe / HgSe występuje wiele różnych faz topologicznych. Idealna faza semimetalu Weyla jest realizowana w nienaprężonej supersieci HgTe / HgSe, która przekształca się w izolator topologiczny z wąską szczeliną i wieloma inwersjami pasm, gdy jest poddawana ścisnąjącemu odkształceniu jednoosiowemu.

(ii) **Faza kwantowa MSi₂Z₄, nowego syntetycznego materiału 2D (M = Mo, W i Z = N, P, As)** : Ultracienkie warstwy syntetycznego materiału 2D MSi₂Z₄ (M = Mo albo W, Z = N, P albo As) są badane przy użyciu modelowania z pierwszych zasad pod kątem zastosowań w urządzeniach kwantowych ich egzotycznych faz topologicznych z właściwościami elektronowymi zależnymi od spinu. Gdy monowarstwy MSi₂Z₄ (M = Mo, W i Z = N albo As) są układane w stosy tworzą dwuwarstwy lub układ objętościowy, i w związku z tym właściwości elektronowe otrzymanego materiału zależą od jego grubości. W wyniku sprzężenia spin-orbita (SOC) obserwujemy, że monowarstwy są półprzewodnikami o 100% polaryzacji spinowej, ze spinami zablokowanymi w przeciwnych kierunkach wzdłuż kierunku poza płaszczyzną w K i K₀, co prowadzi do dolinowo-spinowego sprzężenia. Polaryzacja spinowa w dwuwarstwie wynosi zero ze względu na obecność symetrii inwersji. Pokazujemy, że podobnie jak w przypadku dwuwarstw MoS₂ i WS₂ pole elektryczne poza płaszczyzną może odwrócić polaryzację spinową dwuwarstw. Ponadto przewidujemy istnienie rodziny struktur 1T' MSi₂Z₄ (M = Mo lub W i Z = P albo As) z przełączalnym izolatorom QSH o dużej przerwie wzbronionej. Inwersja pasma między metalicznymi (Mo/W) stanami d i p P/As jest wprowadzana przez zniekształcenie fazy 2H, co prowadzi do powstania bezwirowych stanów stożka Diraca bez interakcji spin-orbita. Uwzględniając sprzężenie spin-orbita, w punktach przecięcia pasm otwiera się przerwa hybrydyzacyjna 204 meV, dając spolaryzowane spinowo przewodzące stany krawędziowe ze spinowym przewodnictwem Halla. Poprzez zastosowanie pionowego pola elektrycznego wykazaliśmy, że odwróconym pasmem wzbronionym można manipulować, co skutkuje topologicznym przejściem fazowym z QSH do trywialnego izolatora ze stanami krawędzi podobnymi do Rashby. Własności 2H i struktur 1T' zależne od pola elektrycznego mogą okazać się niezwykle przydatne do tworzenia różnych tranzystorów.

Niniejsza praca jest zbiorem publikacji związanych z fazą topologiczną supersieci 3D opartych na HgTe i materiałach 2D MSi₂Z₄ (M = Mo, W i Z = N, P, As).


12.01.2023