

27.11.2015

Streszczenie pracy doktorskiej:

„Właściwości stanów powierzchniowych topologicznych izolatorów krystalicznych, analiza teoretyczna”

Shiva Safaei

W pracy opisane zostały istotne właściwości materiałów topologicznych należących do nowej klasy topologicznych izolatorów krystalicznych. Przedstawione zostały wyniki teoretycznych badań kryształów z grupy IV-VI dotyczące nietrywialnych topologicznie stanów na ich powierzchniach oraz topologicznych własności ich cienkich warstw.

We wstępie do rozprawy omówione zostały ciekawe topologiczne efekty związane z nietrywialną strukturą stanów pasmowych. Omówione zostały: kwantowy efekt Halla występujący w dwuwymiarowym gazie elektronowym w silnych polach magnetycznych, kwantowy spinowy efekt Halla realizowany w studni kwantowej CdTe/HgTe/CdTe oraz efekty związane z własnościami topologicznych izolatorów. We wszystkich tych przypadkach materiał ma izolujące wnętrze jednocześnie posiadając przewodzące stany powierzchniowe (lub krawędziowe). Takie podwójne zachowanie wynika z nietrywialnej topologii stanów pasmowych. W szczególności w izolatorach topologicznych stany pasma walencyjnego i przewodnictwa zamieniają się miejscami w pobliżu nieparzystej ilości punktów strefy Brillouina symetrycznych ze względu na odwrócenie w czasie. Faza izolatora topologicznego może zostać otrzymana w materiałach z silnym sprzężeniem spin-orbita.

Krystaliczne izolatory topologiczne (TIK) mają podobne własności, ale ich nietrywialna topologia stanów pasmowych oraz istnienie przewodzących stanów powierzchniowych chronione jest nie przez symetrię odwrócenia czasu lecz przez symetrię krystaliczną. Odwrócenie przerwy może nastąpić w dowolnej (niekoniecznie nieparzystej) ilości punktów w strefie Brillouina. W pracy opisane zostały argumenty pokazujące, że krystaliczne roztwory stałe $Pb_{1-x}Sn_xTe$ i $Pb_{1-x}Sn_xSe$ dla odpowiednio dużego składu cyny należą do klasy topologicznych izolatorów krystalicznych. Poprzez zwiększanie zawartości Sn w $Pb_{1-x}Sn_xTe$ przerwa energetyczna przekręca się w czterech punktach L strefy Brillouina i pozostaje odwrócona powyżej krytycznej wartości składu. Nietrywialna faza topologiczna chroniona jest przez symetrię zwierciadlane $\{110\}$. Symetrie te chronią również istnienie powierzchniowych stanów przewodzących o dyspersji elektronów Diraca z masą równą zero, pod warunkiem że powierzchnia kryształu nie łamie symetrii zwierciadlanych. W pracy opisane zostały wyniki obliczeń, wykonanych metodą ciasnego wiązania, dotyczących własności elektronowych stanów powierzchni krystalicznych (001), (110) i (111) roztworów stałych $Pb_{1-x}Sn_xTe$ jak też stanów powierzchni (001) i (111) kryształów $Pb_{1-x}Sn_xSe$. W obu wypadkach skład cyny miał wartość powyżej krytycznej. Pokazano że stany są helikalne. Są one niezdegenerowane, kierunek ich polaryzacji spinowej leży w płaszczyźnie powierzchni i jest zależny od kierunku wektora falowego. W rezultacie w dwuwymiarowej strefie Brillouina otrzymujemy tekstury spinowe o kształcie wirów wokół punktów Diraca. Obliczenia przeprowadzone dla $Pb_{0.63}Sn_{0.27}Se$ ujawniły istnienie helikalnych stanów powierzchniowych nie tylko dla fazy krystalicznego izolatora topologicznego, ale co zaskakuje również dla fazy normalnego izolatora. Faza ta uzyskana została poprzez zwiększenie temperatury. Rzeczywiście, $Pb_{0.63}Sn_{0.27}Se$ ulega topologicznemu przejściu fazowemu od krystalicznego izolatora topologicznego do trywialnego izolatora w temperaturze $T=80K$. Wpływ temperatury uwzględniony został w obliczeniach poprzez wpływ zmiany stałej sieci na elementy macierzowe odpowiadające przeskokom elektronów pomiędzy najbliższymi sąsiadami. Badania te zostały w oparciu o przybliżenie kryształu wirtualnego. Do otrzymania parametryzacji ciasnego wiązania dla kubicznego SnSe, która jest niedostępna w literaturze, wykorzystana została metoda teorii funkcjonału gęstości.

Oprócz badań trójwymiarowych kryształów przeprowadzone zostały również obliczenia właściwości ultra cienkich warstw SnTe i SnSe. Oba te materiały są TIK w trójwymiarowej objętości. Pokazano jednoznacznie, że w zakresie konkretnych grubości cienkie warstwy obu

materiałów zorientowane wzdłuż kierunku (111) ulegają topologicznemu przejściu fazowemu od normalnego izolatora, nie do fazy krystalicznego izolatora topologicznego, ale do fazy izolatora topologicznego. Na skutek przecięcia się pasma walencyjnego i przewodnictwa dla określonych grubości, każda z tych warstw uzyskuje nieparzystą liczbę inwersji pasm w punktach niezmienniczych ze względu na symetrię odwrócenia czasu. Możliwość istnienia fazy izolatora topologicznego została dokładnie zbadana i zweryfikowana poprzez obliczanie dla każdego przypadku niezmiennika topologicznego Z_2 . Pokazano również, że w fazie nietrywialnej występuje kwantowy spinowy efekt Halla (KSEH). Stany krawędziowe mają dyspersję liniową łącząc pasmo walencyjne z pasmem przewodnictwa, przy czym stany o różnej polaryzacji spinowej nachylone są w dwu różnych kierunkach i przecinają się w punktach niezmienniczych ze względu na symetrię odwrócenia czasu. W cienkich warstwach o odpowiedniej grubości może więc płynąć spinowo spolaryzowany prąd krawędziowy. Niestety w warstwach SnSe różnica położenia wierzchołków dwuwymiarowych pasm energetycznych w punktach $\bar{\Gamma}$ i \bar{M} powoduje zamykanie się przerwy jednowymiarowych pasm krawędziowych niszcząc KSEH. Na końcu rozprawy przedyskutowano możliwość otwarcia przerwy przy użyciu dwuosiowego naprężenia warstwy. Odpowiednie naprężenie może być uzyskane poprzez wyhodowanie warstwy na podłożu o trochę różnej stałej sieci. Podobny problem nie występuje dla cienkich warstw SnTe. Można więc twierdzić, że zarówno SnTe jak i SnSe są obiecującymi kandydatami dla otrzymania KSHE.

Podsumowując, w pracy przedstawiono wyniki teoretycznych badań interesujące własności helikalnych stanów powierzchniowych objętościowych TIK IV-VI jak i spinowo spolaryzowanych stanów krawędziowych ich cienkich warstw. Niektóre z omawianych obliczeń przeprowadzonych zostało równoległe do badań doświadczalnych. Uzyskano zadawalającą (co najmniej jakościową) zgodność z eksperymentem w każdym z przypadków. Dotyczy to dyspersji stanów powierzchniowych (Pb,Sn)Se dla powierzchni (001) oraz (111) jak i polaryzacji spinowej stanów na powierzchni (001) zarówno w fazie trywialnej jak i w fazie TIK.

Shima Safaei

