Письма в ЖЭТФ, том 104, вып. 7, с. 480 – 487 © 2016 г. 10 октября

Квантовый аномальный эффект Холла в гетероструктурах магнитно-модулированный топологический изолятор/нормальный изолятор

В. Н. Меньшов[+*1)], *В. В. Тугушев*[+*], *Е. В. Чулков*[*×○]

[+] *Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", 123182 Москва, Россия*

[*] *Томский государственный университет, 634050 Томск, Россия*

[×] *Departamento de Física de Materiales, Facultad de Ciencias Químicas, UPV/EHU and Centro de Física de Materiales CFM-MPC, Centro Mixto CSIC-UPV/EHU, 20080 San Sebastián, Basque Country, Spain*

[○] *С.-Петербургский государственный университет, 199034 С.-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 6 июля 2016 г.

В работе теоретически изучается вопрос, как магнитная модуляция может быть использована для управления транспортными свойствами гетероструктур, сформированных тонкой пленкой трехмерного топологического изолятора, помещенной между обкладками нормального изолятора. С использованием $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ схемы в рамках континуального подхода показано, что электронные состояния системы поляризованы по спину, когда ультратонкие магнитные вставки инкорпорированы в пленку. Продемонстрировано, что: 1) амплитуда спиновой поляризации сильно зависит от позиции магнитной вставки в пленке; 2) существует оптимальная для реализации квантового аномального эффекта Холла позиция вставки, которая является функцией параметров материала, толщины пленки и интерфейсного потенциала на границе между топологическим и нормальным изоляторами. Для гетероструктуры с парой симметрично расположенных магнитных вставок рассчитана фазовая диаграмма, которая показывает ряд переходов между различными квантовыми режимами поперечной проводимости. В контексте представленных результатов предлагается последовательная интерпретация недавно установленных экспериментальных фактов.

DOI: 10.7868/S0370274X16190036

Введение. Поиск новых материалов и гибридных структур с контролируемыми свойствами зарядового и спинового транспорта важен как для основ физики твердого тела, так и для спинтронных приложений [1–4]. В настоящее время появление топологических изоляторов (ТИ) стимулирует поиск новых принципов в проектировании устройств для достижения режимов квантового спинового эффекта Холла (КСЭХ) и квантового аномального эффекта Холла (КАЭХ) (с различными аспектами этой проблемы можно ознакомиться по недавним обзорам [5–7] и приведенным там ссылкам). Изготовление магнитоупорядоченных структур, включающих ТИ, с целью получения КАЭХ – довольно трудная задача, поскольку здесь требуется получить большое собственное обменное поле, нормальное к плоскости образца, чтобы обеспечить значительное спиновое расщепление в спектре топологических электронных состояний; одновременно следует сохранить высокую структурную однородность образца и фиксировать химический потенциал внутри энергетической щели топологических состояний [5–7]. Общая практика введения ферромагнитного (ФМ) порядка в трехмерный (3D) ТИ тетрадимидного семейства полупроводников заключается в допировании объема ТИ переходными металлами [8, 9]. Базовой системой служит материал $(\mathrm{Bi,Sb})_2\mathrm{Te}_3$, содержащий несколько атомных процентов $3d$-металла: Cr, V, Mn или Fe. Такой разбавленный магнитный ТИ демонстрирует дальний ФМ порядок примесных магнитных моментов ниже температуры Кюри $T_c \sim 30$ К [10].

Недавно появились сообщения об измерении КАЭХ в тонких пленках ФМТИ $\mathrm{Cr}_x(\mathrm{Bi}_{1-y}\mathrm{Sb}_y)_{2-x}\mathrm{Te}_3$ и $\mathrm{V}_x(\mathrm{Bi}_{1-y}\mathrm{Sb}_y)_{2-x}\mathrm{Te}_3$ [5–7]. Однако этот эффект был обнаружен только при очень низких температурах, ниже 100 мК, несмотря на сравнительно высокую температуру T_c и энергию обменного расщепления $\sim 10-50$ мэВ. Бытует представление, что основной причиной столь низкой температуры возникновения КАЭХ

1)e-mail: vnmenshov@mail.ru

являются флуктуации концентрации магнитных ионов $3d$-металлов на масштабе в несколько нм, что ведет к неоднородному обменному полю в пленках ФМТИ. Это подтверждается картиной энергетической щели в спектре поверхностных состояний, полученной из данных сканирующей туннельной спектроскопии [11]. Концентрационные флуктуации сильно размывают края энергетической щели, поэтому фаза КАЭХ весьма чувствительна к термическим возбуждениям квазичастиц через щель в магнито-оптических измерениях. Кроме того, в реальности при объемном допировании матрицы ТИ $3d$-металлами ситуация может радикально измениться в силу следующих обстоятельтв: i) материал может стать металлическим благодаря появлению свободных носителей; ii) спин-орбитальная связь может оказаться недостаточно большой, чтобы инвертировать зонную структуру, что ведет к тривиальной зонной топологии; iii) беспорядок в распределении примесных атомов и их кластеризация модифицируют зонную структуру так, что топологический порядок может исчезнуть из-за примесного рассеяния на магнитных ионах; iiii) выше предела растворимости химческая формула материала может значительно измениться локально. Кроме того, спин-поляризованные проводящие каналы вдоль краев пленки ТИ, которые непосредственно связаны с квантованием холловского отклика, топологически защищены от рассеяния на немагнитных дефектах, но они уязвимы для магнитного беспорядка.

Известен, однако, иной способ породить в пленке ТИ области с нарушенной симметрией по отношению к обращению времени. В работе [12] Kou et al. приготовили бислойную гетероструктуру (ГС) $(\mathrm{Bi}_z\mathrm{Sb}_{1-z})_2\mathrm{Te}_3/\mathrm{Cr}_x(\mathrm{Bi}_y\mathrm{Sb}_{1-y})_{2-x}\mathrm{Te}_3$ методом модуляционного легирования, т.е. контролируя профиль распределения допирующих атомов Cr вдоль направления эпитаксиального роста. На основе измерений магнито-оптического эффекта Керра авторы работы [12] идентифицировали вклад топологических поверхностных состояний в намагниченность и показали, что намагниченность зависит от толщины слоя $(\mathrm{Bi}_z\mathrm{Sb}_{1-z})_2\mathrm{Te}_3$ и приложенного напряжения. Авторы работы [13] наблюдали в бислойной ГС, состоящей из 2-нм $\mathrm{Cr}_x(\mathrm{Bi}_{1-y}\mathrm{Sb}_y)_{2-x}\mathrm{Te}_3$ ($x \approx 0.2$) и 5-нм $(\mathrm{Bi}_{1-y}\mathrm{Sb}_y)_2\mathrm{Te}_3$ пленок в сильном внешнем магнитном поле и при $T = 2\,\mathrm{K}$ квантованный холловский отклик с большим вкладом КАЭН.

Совсем недавно в работе [14] была предложена новая ГС архитектура для реализации КАЭХ. Благодаря технологии избирательного легирования, в процессе эпитаксиального роста обогащенные атомами переходного $3d$-металла вставки толщиной в один пятислойник (которые часто называются ФМ дельта-вставками) были регулярно встроены в тонкую пленку ТИ $(\mathrm{Bi}_{1-y}\mathrm{Sb}_y)_2\mathrm{Te}_3$. Такое допирование с селективной модуляцией позволяет усилить обменное расщепление благодаря высокой концентрации $3d$-ионов в дельта-вставках и уменьшить влияние сплавного беспорядка на интерфейсные топологические состояния. По-видимому, эти факторы обеспечили возможность для наблюдения КАЭХ при $1\,\mathrm{K}$ (и даже при температурах несколько Кельвинов), что более чем на порядок выше температуры наблюдения эффекта в пленках $(\mathrm{Bi}_{1-y}\mathrm{Sb}_y)_2\mathrm{Te}_3$, однородно допированных атомами Cr [14]. В работе [15] сообщается о первой экспериментальной демонстрации топологического магнито-электрического эффекта, зарегистрированного в магното-оптическом вращении Фарадея и Керра на тех же образцах с модулированным допированием.

В теоретическом плане исследование вопроса о том, как изолированная ФМ дельта-вставка влияет на электронный спектр матрицы 3D ТИ, было предпринято в работе [16]. Было показано, что потенциальное и обменное рассеяние носителей на дельта-вставке ведет к возникновению двумерных (2D) связанных состояний с щелевым спектром в виде спин-поляризованных подзон внутри объемной запрещенной зоны.

В данной работе, в рамках континуального приближения, аналогичного развитому ранее для исследования квантового холловского отклика в ГС, содержащей немагнитную пленку 3D ТИ [17], или в ГС, содержащей однородно намагниченную пленку 3D ФМТИ [18], мы предлагаем теоретический подход для описания пленки 3D ТИ с магнитно-модулированным допированием (ММДТИ), контактирующей с нормальным изолятором (ТИ). Имея в виду структуры, экспериментально исследованые в [14, 15], мы здесь сосредоточим внимание на трехслойной ГС НИ/ММДТИ/НИ, где магнитная модуляция имеет вид ряда ФМ дельта-вставок, каждая из которых моделируется как локализованное в плоскости пленки 2D обменное поле. Мы приводим аргументы в пользу того, что с точки зрения реализации режима КАЭХ такой способ введения магнетизма в пленку ТИ может оказаться более эффективным, чем случай с более-менее однородным рапределением намагниченности в пленке ТИ. Для структуры с двумя дельта-вставками мы находим их оптимальные позиции в пленке, которые обеспечивают максимальное обменное расщепление топологического состояния. Эти позиции зависят от параметров самого материала ТИ, толщины пленки и свойств ММДТИ/НИ интерфейса. Наши результаты дают разумное объяснение недавним экспериментальным наблюдениям [14, 15].

Модель для ГС НИ/ММДТИ/НИ. Мы рассматриваем трехслойную ГС НИ/ММДТИ/НИ, сформированную пленкой 3D ТИ с заданной конфигурацией распределения магнитной примеси, при этом пленка сэндвичирована обкладками 3D НИ с большой запрещенной зоной. Мы полагаем, что амплитуда намагниченности неоднородна в пленке ТИ вдоль направления роста трехслойной ГС $\mathbf{z}$, а вектор намагниченности направлен вдоль оси $\mathbf{z}$ в согласии с экспериментальной ситуацией [5–7, 14]. Пленка ММДТИ ограничена конечной областью $|z| < l$; ММДТИ/НИ интерфейсы, расположенные при $z = \pm l$, считаем идеально плоскими, что гарантирует сохранение трансляционной симметрии в плоскости (x, y). Трехслойная ГС предполагается структурно симметричной, т.е. оба ММДТИ/НИ интерфейса идентичны. Потенциал на границе между ММДТИ и НИ отличается от объемного потенциала в этих материалах. Следуя логике работ [17–22], мы вводим взаимодействие электронов в пленке ММДТИ с внешним возмущением, локализованным на интерфейсах, используя эффективный интерфейсный потенциал (ИП). Таким образом, функционал электронной энергии пленки ММДТИ, сандвичированной НИ обкладками, запишем в виде:

$$\Omega = \int\limits_{|z|\le l} d\mathbf{r}\Theta^{+}(\mathbf{r})[\mathbb{H}_t(-i\nabla) + \mathbb{U}(\mathbf{r}) + \mathbb{H}_{ex}(\mathbf{r})]\Theta(\mathbf{r}). \quad (1)$$

Здесь 4×4 гамильтонианы $\mathbb{H}_t$, $\mathbb{U}$ и $\mathbb{H}_{ex}$ представлены в минимальном базисе, $u_\Gamma = \{|+\uparrow\rangle, |-\uparrow\rangle, |+\downarrow\rangle, |-\downarrow\rangle\}$, образованном четырьмя состояниями, различающимися четностью ($+$ или $-$) и проекцией спина ($\uparrow$ или $\downarrow$) на ось квантования $\mathbf{z}$, как принято в модели зонной структуры прямозонных полупроводниковых материалов типа Bi_2Se_3 вблизи Γ точки [23]. Эти операторы действуют в пространстве спинорных огибающих функций (ОФ) $\Theta(\mathbf{r})$ $[\mathbf{r} = (x, y, z)]$, которые описывают длинноволновые состояния с низкой энергией. В рамках $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ метода гамильтониан объемного ТИ выражается стандартным образом:

$$\mathbb{H}_t(\mathbf{k}) = (\Xi - Bk^2)\tau_z \otimes \sigma_0 + \mathrm{A}\tau_x \otimes (\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{k}), \quad (2)$$

где $\mathbf{k}$ – это волновой вектор, отсчитываемый от Γ точки, σ_α и τ_β $(\alpha, \beta = 0, x, y, z)$ суть матрицы Паули в спиновом и орбитальном пространстве, соответственно. Условие $\Xi\mathrm{B} > 0$ определяет инвертированный (из-за сильной спин-орбитальной связи) порядок в уровнях энергии базисных состояний вблизи $\mathbf{k} = 0$.

Согласно [19–22], чтобы учесть влияние интерфейсов на пленку ММДТИ, мы используем феноменологический ИП, обозначенный как $\mathbb{U}(\mathbf{r})$. Пространственное изменение ОФ в направлении $\mathbf{z}$ считаем медленным на масштабе локализации ИП $\mathrm{U}(\mathbf{r})$, $\sim d$ (порядка нескольких постоянных решетки), поэтому можно принять локальное приближение: $\mathbb{U}(\mathbf{r}) \to \mathbb{U}(z) = d\mathbb{U}\delta(|z| - l)$. Полагаем, что ИП не зависит от спина и поэтому может быть записан в форме диагональной матрицы $\mathbb{U} = \mathrm{diag}\{U_1, U_2, U_1, U_2\}$, компоненты которой связаны с относительными энергетическими сдвигами между краями зон в спектрах материалов ММДТИ и НИ [19].

Обменная компонента взаимодействия электронов в 3D ТИ с намагниченностью примесей может быть представлена в базисе u_Γ через диагональную матрицу $\mathbb{H}_{ex} = \mathrm{diag}\{G, F, -G, -F\}$, которая содержит энергии обменного расщепления, G и F, для орбиталей различной четности. В случае 3D ФМТИ с макроскопически однородным распределением магнитных примесей энергии обменного расщепления в приближении среднего поля оцениваются как $G = cj_+S$ и $F = cj_-S$, где S – величина магнитного момента на примесном ионе, c – концентрация примесей, $j_\pm$ – эффективные обменные интегралы для соответствующих орбиталей. Рассматриваемая в настоящей работе ситуация с трехслойной ГС НИ/ММДТИ/НИ является более сложной, т.к. энергии обменного расщепления обретают пространственную зависимость, $G \to G(z)$ и $F \to F(z)$, вследствие макроскопически неоднородного распределения магнитных примесей в пленке вдоль направления роста ГС. Заметим, что G и F могут различаться как по величине, так и по знаку. В дальнейшем анализе обменное расщепление предполагается сравнительно слабым, $|G, F| \ll \Xi$.

Далее мы используем методику теории возмущений [17, 18], чтобы свести 3D модель для ГС НИ/ММДТИ/НИ, которая представлена функционалом (1), к 2D эффективному гамильтониану $\mathbb{H}_{\mathrm{eff}}(\boldsymbol{\kappa})$. Для этого трактуем оператор $\mathbb{H}_0 = \mathbb{H}_t(\boldsymbol{\kappa} = 0, k_z \to -i\partial/\partial z) + \mathbb{U}(z)$, включающий ИП, как невозмущенный гамильтониан и находим его собственные энергии и собственные функции. Зависящие от плоскостного импульса $\boldsymbol{\kappa}$ компоненты в $\mathbb{H}_t(\boldsymbol{\kappa}, -i\partial_z)$ (2) и обменный потенциал $\mathbb{H}_{ex}(z)$ рассматриваются как возмущения. С точностью до второго порядка по $\boldsymbol{\kappa}$ и первого порядка по $\mathbb{H}_{ex}(z)$, в ортогональном базисе, составленном из четырех состояний с наинизшей энергией, $|E_{\varphi,\chi}| \ll \Xi$, $\{\varphi^\sigma|E_\varphi\}$

и $\{\chi^\sigma|E_\chi\}$, $\sigma=\uparrow,\downarrow$, мы можем вывести гамильтониан $\mathbb{H}_{\rm eff}(\boldsymbol{\kappa})$.

Рассмотрим симметричный (относительно середины пленки, $z=0$) обменный потенциал, который описывается четными функциями $G(z)$ и $F(z)$. В таком случае эффективный гамильтониан можно записать в блок-диагональной форме:

$$\mathbb{H}_{\rm eff}(\boldsymbol{\kappa}) = {\rm diag}\{{\rm f}^{\Uparrow}(\boldsymbol{\kappa}), {\rm f}^{\Downarrow}(\boldsymbol{\kappa})\}, \qquad (3)$$

$${\rm f}^{\Uparrow}(\boldsymbol{\kappa}) = \varepsilon^{\Uparrow}(\kappa) + \begin{pmatrix} \Delta^{\Uparrow}(\kappa) & {\rm A}^{\uparrow\downarrow}_{\varphi\chi}k_- \\ {\rm A}^{\downarrow\uparrow}_{\chi\varphi}k_+ & -\Delta^{\Uparrow}(\kappa) \end{pmatrix},$$

$${\rm f}^{\Downarrow}(\boldsymbol{\kappa}) = \varepsilon^{\Downarrow}(\kappa) + \begin{pmatrix} -\Delta^{\Downarrow}(\kappa) & {\rm A}^{\uparrow\downarrow}_{\chi\varphi}k_- \\ {\rm A}^{\downarrow\uparrow}_{\varphi\chi}k_+ & \Delta^{\Downarrow}(\kappa) \end{pmatrix}, \qquad (4)$$

где $k_\pm = k_x \pm i k_y$. Обменный потенциал снимает спиновое вырождение φ- и χ-состояний, $E_\varphi \to E^\sigma_\varphi = E_\varphi + V^{\sigma\sigma}_{\varphi\varphi}$, $E_\chi \to E^\sigma_\chi = E_\chi + V^{\sigma\sigma}_{\chi\chi}$, и дает вклад в диагональные члены, $\Delta^{\Uparrow/\Downarrow}(\kappa) = \Delta_0^{\Uparrow/\Downarrow} - b\kappa^2$, $\varepsilon^{\Uparrow/\Downarrow}(\kappa) = E_0^{\Uparrow/\Downarrow} - D\kappa^2$, где $2\Delta_0^{\Uparrow/\Downarrow} = E_\varphi^{\uparrow/\downarrow} - E_\chi^{\downarrow/\uparrow}$, $E_0^{\Uparrow/\Downarrow} = E_\varphi^{\uparrow/\downarrow} + E_\chi^{\downarrow/\uparrow}$, $2D = {\rm B}_\varphi + {\rm B}_\chi$, $2b = {\rm B}_\varphi - {\rm B}_\chi$. Параметры D и b, которые не зависят от спинового индекса σ, определяются матричными элементами переходов между базисными состояниями: ${\rm B}_\varphi = {\rm B}\int\limits_{-l}^{l} dz \varphi^{\sigma^+}\sigma_z\varphi^\sigma$, ${\rm B}_\chi = {\rm B}\int\limits_{-l}^{l} dz\chi^{\sigma^+}\sigma_z\chi^\sigma$, при соблюдении условия нормировки $\int\limits_{-l}^{l} dz\varphi^{\sigma^+}\sigma_0\varphi^\sigma = \int\limits_{-l}^{l} dz\chi^{\sigma^+}\sigma_0\chi^\sigma = 1$. В свою очередь, ${\rm A}^{\sigma,-\sigma}_{\varphi\chi} = {\rm A}\int\limits_{-l}^{l} dz\varphi^{\sigma^+}\sigma_x\chi^{-\sigma}$, ${\rm A}^{\sigma,-\sigma}_{\chi\varphi} = [{\rm A}^{-\sigma,\sigma}_{\varphi\chi}]^*$, ${\rm A}^{\sigma,-\sigma}_{\chi\varphi} = -{\rm A}^{-\sigma,\sigma}_{\chi\varphi}$. Наличие обменного потенциала вызывает появление зависящих от спина матричных элементов:

$$V^{\sigma\sigma}_{\varphi\varphi} = \sigma\int\limits_{-l}^{l} dz\varphi^{\sigma^+}(z)\begin{pmatrix} G(z) & 0 \\ 0 & F(z)\end{pmatrix}\varphi^\sigma(z),$$

$$V^{\sigma\sigma}_{\chi\chi} = \sigma\int\limits_{-l}^{l} dz\chi^{\sigma^+}(z)\begin{pmatrix} G(z) & 0 \\ 0 & F(z)\end{pmatrix}\chi^\sigma(z), \qquad (5)$$

где знак множителя $\sigma = +/-$ согласуется с верхним индексом $\sigma = \uparrow / \downarrow$. Базисные функции $\varphi^\sigma(z)$ и $\chi^\sigma(z)$ это биспиноры, компоненты которых могут быть представлены (благодаря симметрии системы вдоль оси z) как четные и нечетные комбинации экспоненциальных функций, так что φ-состояние и χ-состояние обладают противоположными пространственными четностями [17, 18].

Гамильтониан $\mathbb{H}_{\rm eff}(\boldsymbol{\kappa})$ (3) распадается на два блока ${\rm f}^{\Uparrow}$ и ${\rm f}^{\Downarrow}$ (4) с противоположными проекциями псевдоспиновой степени свободы $\Sigma = \Uparrow / \Downarrow$, которая является хорошим квантовым числом [24]. Заметим, что благодаря присутствию обменного поля в пленке ММДТИ, блоки в (3) не эквивалентны друг другу при обращении времени, что могло бы привести к возникновению КАЭХ. Как отмечено в работах [17, 18], параметры E_0^Σ, D, Δ_0^Σ и b, которые определяют блоки (4), зависят не только от характеристик объемного гамильтониана (2), Ξ, B, A, но также от толщины пленки, $2l$, и компонент ИП, $U_{1,2}$. Щель Δ_0^Σ вместе с дисперсионным параметром b определяют топологический режим системы. Как показано ниже, на щель Δ_0^Σ может заметно влиять профиль распределения обменного потенциала, $G(z)$ и $F(z)$. Чтобы уловить этот важный физический эффект, мы ограничимся случаем относительно толстой пленки, толщина которой превышает масштаб изменения ОФ, $\sim \exp(-2p_0 l) \ll 1$, где $p_0 = |{\rm A}|/2{\rm B}$, и проанализируем ИП с особой композицией матричных элементов, именно $U_1 = -U_2 = U$. Такой тип ИП интересен по той причине, что позволяет явно аналитически описать влияние интерфейса при произвольной величине U. В используемом приближении энергии соответствующих электронных состояний малы, $|E^\sigma_{\varphi,\chi}| \ll \Xi$, поэтому процедура теории возмущений на редуцированном базисе вполне оправдана. Кроме того, мы ограничимся ситуацией $(E/\Xi)^2 < 4\lambda(1-\lambda) < 1$, где $\lambda = {\rm A}^2/4{\rm B}\Xi$, $0<\lambda<1$.

Если перекрытие ОФ состояний, которые возникают вблизи противоположных интерфейсов при $z=\pm l$, достаточно мало, тогда компоненты базисных биспиноров $\varphi^\sigma(z)$ и $\chi^\sigma(z)$ можно аппроксимировать симметричными и антисимметричными комбинациями ОФ связанных состояний для полубесконечного 3D ТИ:

$$\varphi^\sigma(z) = a^\sigma_\varphi \begin{pmatrix} i\sum\limits_{n=\pm1}\psi(l+nz) \\ \sigma{\rm sgn}({\rm A})\sum\limits_{n=\pm1} n\psi(l+nz)\end{pmatrix},$$

$$\chi^\sigma(z) = a^\sigma_\chi \begin{pmatrix} i\sum\limits_{n=\pm1} n\psi(l+nz) \\ \sigma{\rm sgn}({\rm A})\sum\limits_{n=\pm1} \psi(l+nz)\end{pmatrix}, \qquad (6)$$

$$\psi(\zeta) = \exp(-p_0\zeta)\sin(w_0\zeta+\gamma),$$

$$|a|^2 \equiv |a^\sigma_\varphi|^2 = |a^\sigma_\chi|^2 = \frac{p_0(1-\lambda+\widetilde{U}^2)}{(1-\lambda)[1+(\sqrt{\lambda}-\widetilde{U})^2]}, \qquad (7)$$

где $\sin\gamma = \frac{\sqrt{1-\lambda}}{\sqrt{1-\lambda+\widetilde{U}^2}}$, $\cos\gamma = \frac{-\widetilde{U}}{\sqrt{1-\lambda+\widetilde{U}^2}}$, $\widetilde{U} = \frac{dU}{\sqrt{{\rm B}\Xi}}$ – безразмерная величина ИП, $w_0 = p_0\sqrt{\lambda^{-1}-1}$. ИП напрямую определяет амплитуду ОФ на интерфейсе, $|\varphi^\sigma(|z|=l)|^2 \approx |\chi^\sigma(|z|=l)|^2 \approx \frac{p_0}{1+(\sqrt{\lambda}-\widetilde{U})^2}$.

В отсутствие обменного поля параметры эффективного гамильтониана имеют вид:

$$\Delta_0 = (E_\varphi - E_\chi)/2 = 8|a|^2 \mathrm{B} w_0 \sin(2w_0 l + 2\gamma)\exp(-2p_0 l), \quad (8)$$

$$B = -4|a|^2 \mathrm{B} l \cos(2w_0 l + 2\gamma)\exp(-2p_0 l), \quad (9)$$

$\varepsilon^{\Uparrow/\Downarrow}(\kappa) = 0$ и $\mathrm{A}^{\sigma,-\sigma}_{\varphi\chi} = i\sigma|\mathrm{A}|(a^\sigma_\varphi)^* a^{-\sigma}_\chi/|a|^2$. В условиях модулированного допирования пленки магнитными примесями щель Δ_0^Σ приобретает обменный вклад помимо гибридизационного вклада Δ_0 (8). Сравним эффект спинового расщепления для двух принципиально различных распределений магнитных примесей в пленке: однородного и селективного. В первом случае просто зададим профиль обменного поля как равномерный, $G(z) = G_0 = \mathrm{const}$ и $F(z) = F_0 = \mathrm{const}$, тогда полная щель равна

$$\Delta_0^{\Uparrow/\Downarrow} = \Delta_0 \pm (G_0 + F_0)/2. \quad (10)$$

Во втором случае представим профиль обменного поля с помощью локальной конфигурации, $G(z) = g\delta(|z| - z_0)$ и $F(z) = f\delta(|z| - z_0)$, $0 < z_0 < l$. Тогда получаем выражение

$$\Delta_0^{\Uparrow/\Downarrow} = \Delta_0 \pm (g + f)|a|^2 \psi^2(l - z_0). \quad (11)$$

Чтобы сравнивать эти два случая на равных основаниях, наложим ограничения $lG_0 = g$ и $lF_0 = f$, которые означают, что полное количество магнитных примесей в пленке, $\int_{-l}^{l} dz c(z)$, фиксировано. Как следует из формул (10) и (11), величина спинового расщепления, связанного с локальным профилем, в $\sim 2p_0 l$ раз больше, чем величина спинового расщепления, связанного с однородным профилем. Это значит, что для сравнительно толстых пленок селективное допирование предпочтительнее равномерного. Действительно, в последнем случае основная доля магнитных примесных атомов практически не дает вклада в спиновое расщепление φ- и χ-состояний (6). В то же время, имеется специфика, касающаяся выбора позиции ФМ дельта-вставки в пленке, $z_0 = z_0^{(m)}$, которая обеспечивает максимальное спиновое расщепление в спектре гамильтониана (3). Согласно уравнению (11), оптимальная позиция вставки, конечно, должна совпадать с максимумом квадрата ОФ. Пространственное поведение ОФ довольно сложное: экспоненциальный спад по направлению к середине пленки на масштабе $\sim p_0^{-1}$ сопровождается осцилляциями с периодом $\sim w_0^{-1}$, где p_0 и w_0 – функции материальных параметров 3М ТИ. При этом важно, что фаза осцилляций ОФ, γ, жестко связана с величиной ИП, следовательно $z_0^{(m)} = z_0^{(m)}(\lambda, U)$. В пределе $\exp(-2p_0 l) \to 0$ зависимость амплитуды ОФ от расстояния до интерфейса, $\zeta = l - |z|$, хорошо аппроксимируется функцией $\psi(\zeta)$ (7), если $\zeta \ll l$. Рис. 1 демонстрирует зависимость ψ^2 от ζ и U при заданном $\lambda = 0.5$. Видно, когда ИП сравнительно

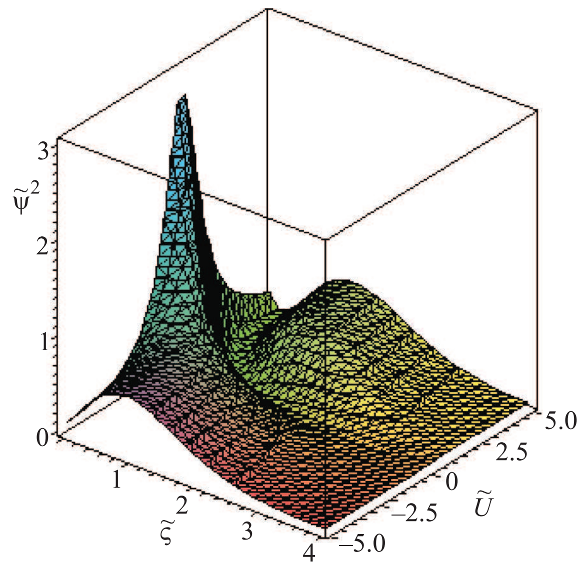

Рис. 1. (Цветной онлайн) Зависимость квадрата ОФ от расстояния от ММДТИ/НИ интерфейса и значения ИП, которые представлены в безразмерных единицах $\tilde{\psi}^2(\tilde{\zeta}) = \frac{4\sqrt{\lambda}(1-\lambda+\widetilde{U}^2)}{(1-\lambda)[1+(\sqrt{\lambda}-\widetilde{U})^2]}\psi^2(\zeta)$, $\widetilde{U} = \frac{dU}{\sqrt{\mathrm{B}\Xi}}$, $\tilde{\zeta} = \zeta\sqrt{\frac{\Xi}{\mathrm{B}}}$ и $\lambda = 0.5$

слабый, $|\widetilde{U}| \lesssim 2$, функция $\psi^2(\zeta)$ достигает наибольшего значения строго на интерфейсе, $z_0^{(m)} = l$; когда же ИП сравнительно сильный, $|\widetilde{U}| \gtrsim 2$, функция $\psi^2(\zeta)$ достигает максимума в некоторой окрестности интерфейса, $z_0^{(m)} < l$.

Топологический режим в трехслойной ГС НИ/ММДТИ/НИ проявляется через ее собственный холловский отклик [5–7]. Если химический потенциал лежит внутри спектральной щели, $|\mu| < |\mathrm{A}|\sqrt{4b\Delta_0^\Sigma - \mathrm{A}^2}/2b$ [18], проводимость Холла σ^Σ_{xy} квантуется, т.е. $\sigma^\Sigma_{xy} = C^\Sigma e^2/h$, где C^Σ идентифицирует топологическое ($C^\Sigma = \pm 1$) или тривиальное ($C^\Sigma = 0$) состояние соответствующего блока в гамильтониане (3). Зарядовая проводимость с фактором $C^C = C^\Uparrow + C^\Downarrow$ идентифицирует режим КАЭХ, в то время как спиновая проводимость с фактором $C^S = C^\Uparrow - C^\Downarrow$ отвечает режиму КСЭХ. В работе [18] показано, что эти факторы можно выразить через параметры диагональных матричных элементов в $\mathbb{H}_{\mathrm{eff}}(\boldsymbol{\kappa})$ (3), (4), именно $C^C = [\mathrm{sgn}(\Delta_0^\Uparrow) - \mathrm{sgn}(\Delta_0^\Downarrow)]/2$ и

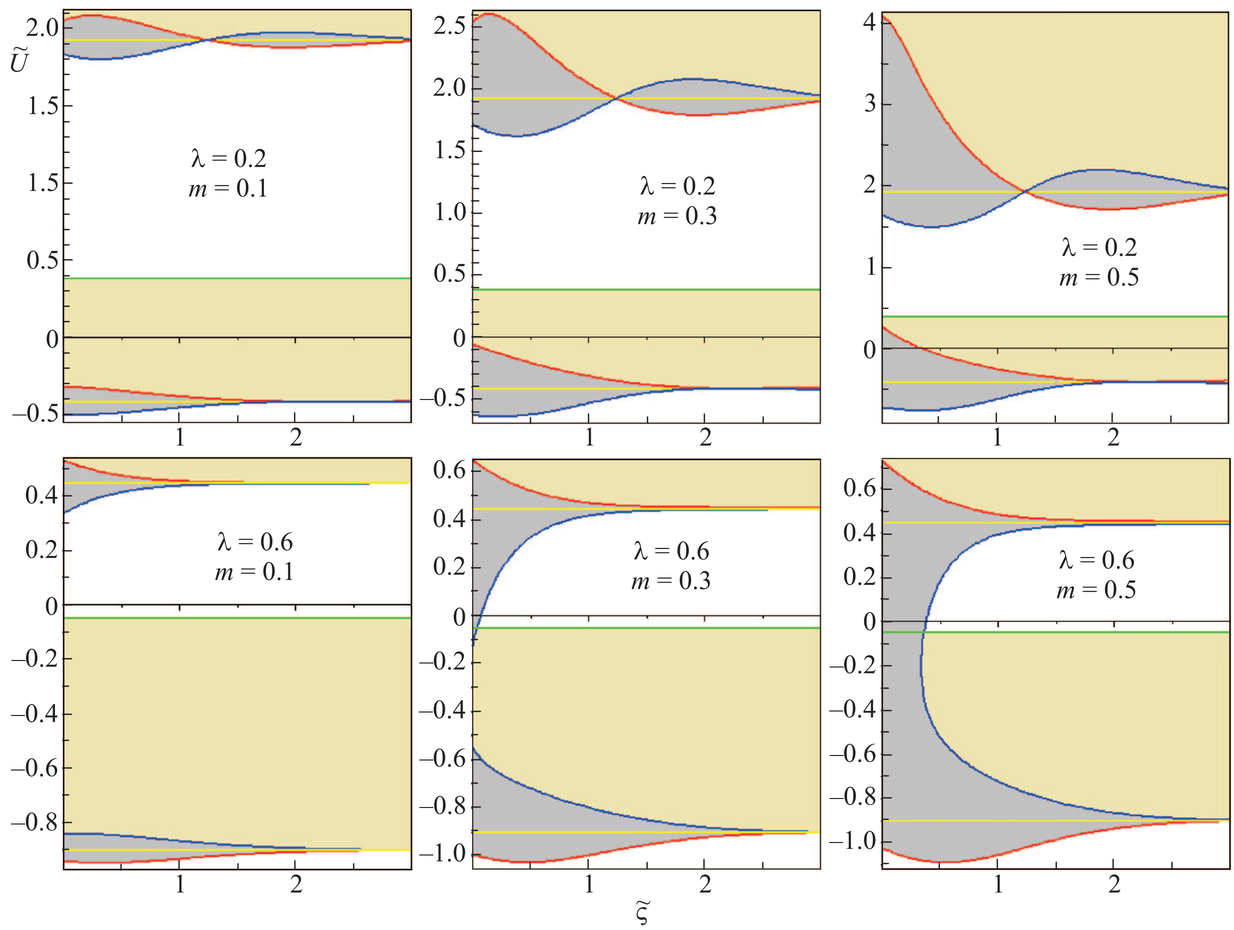

Рис. 2. (Цветной онлайн) Фазовая диаграмма пленки ММДТИ, сэндвичированной обкладками НИ и содержащей пару симметрично расположенных ФМ дельта-вставок на расстоянии $\zeta = l - |z|$ от интерфейса. Диаграмма представлена на плоскости "значение ИП – расстояние от интерфейса" для различных величин обменного потенциала. Толщина пленки задана как $\tilde{l} = 4$ и предложены два варианта для параметра зонной структуры: $\lambda = 0.2$ и $\lambda = 0.6$. Показаны области топологически различных фаз, которые характеризуются комбинациями знаков параметров $\Delta_0^{\Uparrow}$, $\Delta_0^{\Downarrow}$ и b. Серые области отвечают смешанной фазе с КАЭХ + КСЭХ, светло-коричневые области отвечают фазе с КСЭХ, белые (незакрашенные) области отвечают тривиальной фазе. Смешанная фаза очерчена красными и синими кривыми, которые описаны, соответственно, уравнениями $\Delta_0^{\Uparrow}(U,\zeta,\lambda,m) = 0$ и $\Delta_0^{\Downarrow}(U,\zeta,\lambda,m) = 0$ (11). Горизонтальные желтые линии заданы уравнением $\Delta_0(U,\lambda) = 0$ (8). Горизонтальная зеленая линия задана уравнением $b(U,\lambda) = 0$, (9). Использованы безразмерные единицы: $\widetilde{U} = \frac{dU}{\sqrt{\mathrm{B}\Xi}}$, $m = \frac{(g+f)\exp(2\sqrt{\lambda}\tilde{l})}{16\sqrt{1-\lambda}\sqrt{\Xi\mathrm{B}}}$, $\tilde{\zeta} = \zeta\sqrt{\frac{\Xi}{\mathrm{B}}}$, $\tilde{l} = l\sqrt{\frac{\Xi}{\mathrm{B}}}$

$C^S = \mathrm{sgn}(b) + [\mathrm{sgn}(\Delta_0^{\Uparrow}) + \mathrm{sgn}(\Delta_0^{\Downarrow})]/2$. Когда обменное расщепление столь велико, что превосходит гибридизационную щель, $|(g+f)|a|^2\psi^2(l-z_0)| > |\Delta_0|$, фаза КАЭХ [$C^C = \mathrm{sgn}(\Delta_0^{\Uparrow}) = -\mathrm{sgn}(\Delta_0^{\Downarrow})$] сосуществует с фазой КСЭХ [$C^S = \mathrm{sgn}(b)$]. Когда обменное расщепление мало, реализуется либо тривиальная изолирующая фаза с $C^C = C^S = 0$ (если $b\Delta_0^{\Sigma} < 0$), либо фаза КСЭХ с $C^C = 0$ и $C^S = 2\mathrm{sgn}(b)$ (если $b\Delta_0^{\Sigma} > 0$). Вообще говоря, конкуренция между гибридизационным и обменным вкладами в полную щель является тем механизмом, который управляет квантовым фазовым переходом из тривиального или КСЭХ режима в смешанный КАЭХ-КСЭХ режим. Установив в уравнениях (8), (9) и (11) поведение параметров Δ_0^{Σ} и b в зависимости от толщины пленки, обменного расщепления и значения ИП, мы можем понять, как различные режимы квантованной проводимости, определяемые целочисленными факторами C^C и C^S, могут контролироваться посредством вариации перечисленных параметров. Рис. 2 представляет фазовую диаграмму для целочисленного квантового эффекта Холла в трехслойной ГС НИ/ММДТИ/НИ на плоскости (ζ, U) при заданной толщине l и при различных значениях обменного потенциала, $g + f$, индуцированного магнитными вставками.

Обсуждение. В отмеченной выше работе [14] влияние магнитного допирования с селективной модуляцией на квантование проводимости Холла в пленке ТИ исследовалось на образцах с номинальной формулой $\mathrm{Cr}_x(\mathrm{Bi}_{1-y}\mathrm{Sb}_y)_{2-x}\mathrm{Te}_3$ ($y = 0.78$) и толщиной 8 пятислойников (QL). Современная эпитаксиальная технология приготовления ультратонких пленок позволяет в процессе роста сильно допировать отдельные слои толщиной $\sim$нм, не допуская интердиффузию. Используя эти возможности, авторы работы [14] вырастили три структуры. Образец # 0 представлял однородно допированную пленку ($x = 0.10$). В образце # 1 первый и восьмой QL в пленке, если считать от границы с подложкой, были сильно допированы атомами Cr ($x = 0.46$ в пределах одного QL), в то время как в образце # 2 аналогичным образом были допированы второй и седьмой QL ($x = 0.46$). Таким образом, суммарное количество примеси Cr в трех образцах оказалось практически одинаковым. Температура Кюри для образцов # 0, 1 и 2 составляла, соответственно, 9, 25 и 25 K. В порядке роста номера образца, # 0, 1, 2, возрастала температура, при которой проводимость Холла достигала квантованной величины $\sigma_{xy} = e^2/h$. При этом в образцах с модулированным допированием # 1 и # 2 КАЭХ ясно наблюдался вплоть до 1 K, что более чем на порядок величины превышает температуру наблюдения эффекта (50 мК) в однородно допированной атомами Cr пленке $(\mathrm{Bi},\mathrm{Sb})_2\mathrm{Te}_3$, т.е. в образце # 0. Заметное различие между образцами наблюдалось также для зависимости КАЭХ от напряжения на затворе, приложенного к обкладкам образцов (gate voltage): плато с квантованной проводимостью оказалось в образце # 2 значительно шире, чем в образцах # 0 и 1. Эти факты свидетельствуют в пользу того, что конфигурация распределения магнитных примесей в образце # 2 обеспечивает наибольшую величину обменного расщепления топологических состояний. В работах [14, 15] показано также, что, варьируя позиции ФМ вставок и состав x и y в пленках ТИ, возможно стабилизировать режим КАЭХ в широком диапазоне напряжения на затворе при максимальной рабочей температуре.

Обсуждаемые экспериментальные результаты [14] можно последовательно интерпретировать в рамках нашей теоретической концепции. В соответствии с уравнениями (10) и (11), при заданном полном количестве магнитных примесей в относительно толстой пленке ТИ обменное расщепление электронных топологических состояний, индуцированное ФМ дельта-вставками, намного больше обменного расщепления, индуцированного равномерно растворенными магнитными примесями. Мы выяснили на микропическом уровне причину, по которой пленка с ФМ вставками, расположенными на некотором расстоянии от ММДТИ/НИ интерфейсов (подобно образцу # 2 в [14]), может оказаться наиболее подходящей структурой для наблюдения КАЭХ при сравнительно высокой температуре. Данный феномен объясняется влиянием ИП. Поэтому представляется весьма полезным детальное изучение роли интерфейсов для электронных свойств ГС НИ/ММДТИ/НИ как экспериментальными, так и *ab initio* численными методами. Заметим, что предложенную нами аналитическую схему легко расширить (по аналогии с [18]) на тот случай, когда химический потенциал лежит вне спектральной щели, что позволило бы описать изменение холловского отклика системы в зависимости от напряжения на затворе.

В итоге: мы предложили аналитическую модель, которая позволяет с принципиальной точки зрения взглянуть на вопрос об использовании магнитно-модулированного допирования для реализации режимов квантованной проводимости в гетероструктурах на базе топологических изоляторов. Наши теоретические предсказания дают основу для понимания недавних экспериментальных наблюдений КАЭХ в трехслойных эпитаксиальных структурах и стимулируют дальнейшие исследования таких систем для реализации уникальных квантовых явлений, связанных с топологией зонных электронов.

Мы весьма признательны за поддержку со стороны С.-Петербургского государственного университета (проект # 15.61.202.2015) и Российского Фонда Фундаментальных Исследований (грант # 16-02-00024).

1. S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnár, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova, and D. M. Treger, Science **294**, 1488 (2001).
2. S. D. Bader and S. S. P. Parkin, Ann. Rev. Cond. Mat. Phys. **1**, 71 (2010).
3. I. Zutic, J. Fabian, and S. Das Sarma, Rev. Mod. Phys. **76**, 323 (2004).
4. D. Pesin and A. H. MacDonald, Nat. Mater. **11**, 409 (2012).
5. C.-Z. Chang and M. Li, J. Phys.: Cond. Mat. **28**, 123002 (2016).
6. X. Kou, Y. Fan, M. Lang, P. Upadhyaya, and K. L. Wang, Sol. State Comm. **215–216**, 34 (2015).

7. H. Weng, R. Yu, X. Hu, X. Dai, and Z. Fang, Advances in Physics **64**, 227 (2015).
8. Y. S. Hor, P. Roushan, H. Beidenkopf, J. Seo, D. Qu, J. G. Checkelsky, L. A. Wray, D. Hsieh, Y. Xia, S.-Y. Xu, D. Qian, M. Z. Hasan, N. P. Ong, A. Yazdani, and R. J. Cava, Phys. Rev. B **81**, 195203 (2010).
9. J. Henk, M. Flieger, I. V. Maznichenko, I. Mertig, A. Ernst, S. V. Eremeev, and E. V. Chulkov, Phys. Rev. Lett. **109**, 076801 (2012).
10. X. F. Kou, W. J. Jiang, M. R. Lang, F. X. Xiu, L. He, Y. Wang, Y. Wang, X. X. Yu, A. V. Fedorov, P. Zhang, and K. L. Wang, J. Appl. Phys. **112**, 063912 (2012).
11. I. Lee, C. K. Kim, J. Lee, S. J. L. Billinge, R. Zhong, J. A. Schneeloch, T. Liu, T. Valla, J. M. Tranquada, G. Gu, and J. C. S. Davis, PNAS **112**, 1316 (2015).
12. X. Kou, L. He, M. Lang, Y. Fan, K. Wong, Y. Jiang, T. Nie, W. Jiang, P. Upadhyaya, Z. Xing, Y. Wang, F. Xiu, R. N. Schwartz, and K. L. Wang, Nano Lett. **13**, 4587 (2013).
13. R. Yoshimi, K. Yasuda, A. Tsukazaki, K. S. Takahashi, N. Nagaosa, M. Kawasaki, and Y. Tokura, Nat. Commun. **6**, 8530 (2015).
14. M. Mogi, R. Yoshimi, A. Tsukazaki, K. Yasuda, Y. Kozuka, K. S. Takahashi, M. Kawasaki, and Y. Tokura, Appl. Phys. Lett. **107**, 182401 (2015).
15. K. N. Okada, Y. Takahashi, M. Mogi, R. Yoshimi, A. Tsukazaki, K. S. Takahashi, N. Ogawa, M. Kawasaki, and Y. Tokura, arXiv:1603.02113 (2016).
16. V. N. Men'shov, V. V. Tugushev, and E. V. Chulkov, JETP Lett. **96**, 445 (2012).
17. V. N. Men'shov, V. V. Tugushev, and E. V. Chulkov, JETP Lett. **102**, 754 (2015).
18. V. N. Men'shov, V. V. Tugushev, and E. V. Chulkov, EPL (Europhysics Lett.) **114**, 37003 (2016).
19. V. N. Men'shov, V. V. Tugushev, T. V. Menshchikova, S. V. Eremeev, P. M. Echenique, and E. V. Chulkov, J. Phys.: Cond. Matt. **26**, 485003 (2014).
20. V. N. Men'shov, V. V. Tugushev, and E. V. Chulkov, JETP Lett. **97**, 258 (2013).
21. V. N. Men'shov, V. V. Tugushev, and E. V. Chulkov, JETP Lett. **98**, 603 (2013).
22. V. N. Men'shov, V. V. Tugushev, S. V. Eremeev, P. M. Echenique, and E. V. Chulkov, Phys. Rev. B **91**, 075307 (2015).
23. H. Zhang, C.-X. Liu, X.-L. Qi, X. Dai, Z. Fang, and S.-C. Zhang, Nat. Phys. **5**, 438 (2009).
24. H.-Z. Lu, W.-Y. Shan, W. Yao, Q. Niu, and S.-Q. Shen, Phys. Rev. B **81**, 115407 (2010).