

Аннотация

Топологические изоляторы интересны за счет своей зонной структуры, поверхностным состояниям и ряду эффектов, позволяющих реализовать на них основные задачи спинтроники. Одним из таких эффектов является квантовый аномальный эффект Холла, который свойственен магнитным топологическим изоляторам. Он описывает состояния проводимости на краях доменов, по которым может проходить бездиссипативный спин-поляризованный транспорт электронов.

Работа посвящена изучению динамики магнитных доменов в антиферромагнитном топологическом изоляторе $\text{Ge}_x\text{Mn}_{1-x}\text{Bi}_2\text{Te}_4$ в приложенном магнитном поле. Методом криогенной магнитно-силовой микроскопии были получены карты магнитного сигнала при различных полях, температурах и расстояниях до образца. Полученные данные сигнализируют о наличии в образце поверхностного и объемного спин-флоп эффектов. Причем для поверхностного перехода было получено разное поле перехода в зависимости от окончания домена - направления магнитного момента верхнего слоя, что не описывается теоретическими моделями. На картах магнитного сигнала мы видим образование сильной флуктуационной фазы. Было проведено моделирование объемных и поверхностных свойств материала. В ходе этого получено хорошее соответствие объемных свойств, полученных численно, с известными значениями. Моделирования поверхностных свойств описывают лишь часть обнаруженных эффектов.

Оглавление

Введение	4
Глава 1. Литературный обзор	6
1.1. О роли топологии	6
1.2. Топологические и магнитные топологические изоляторы	7
1.3. Антиферромагнетик в магнитном поле	12
1.4. Топологический изолятор $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$	15
1.5. Топологические изоляторы типа A_2B_3 ($\text{A} = \text{Bi/Sb}$, $\text{B} = \text{Te}$)	16
1.6. Магнитный топологический изолятор $(\text{Mn, Ge})\text{Bi}_2\text{Te}_4$	18
Глава 2. Экспериментальные методы	22
2.1. Криогенная магнитно-силовая микроскопия	22
Глава 3. Обсуждение и результаты	33
3.1. Подготовка образца	33
3.2. Измерения АСМ и МСМ нулевом поле	34
3.3. Измерения МСМ в магнитном поле	36
3.4. Магнитное моделирование	41
Заключение	46
Благодарность	47
Список литературы	48

Введение

Топологические изоляторы обладают необычной зонной структурой и краевыми состояниями. В то время, как в объеме для них характерна запрещенная зона, на поверхности реализуются бесщелевые металлические состояния с линейной дисперсией. Что вместе с множеством других эффектов, которые могут стать основой для решения основных задач спинтроники [1], подогревает интерес к изучению их свойств. В 2019 году вышла статья [2] посвященная объединению магнитных и топологических свойств в одном материале - собственном магнитном топологическом изоляторе MnBi_2Te_4 . В них открывается магнитная щель в поверхностных состояниях. В таком веществе присутствует квантовый аномальный эффект Холла. Он описывает состояния краевой проводимости бездиссипативного спин-поляризованого транспорта электронов на краях магнитных доменов [3]. На размер магнитной щели влияет величина эффективного магнитного момента на поверхности [4] и приложенного поверхностного заряда [5]. Все это мотивирует к изучению поверхностных магнитных эффектов в магнитном топологическом изоляторе. В 2020 году вышла работа [6] исследующая поверхностные эффекты в MnBi_2Te_4 . В ней было показано, что этот кристалл - первый собственный антиферромагнетик, в котором был обнаружен поверхностный спин-флоп переход.

Работа посвящена изучению динамики магнитных доменов в антиферромагнитном топологическом изоляторе $\text{Ge}_x\text{Mn}_{1-x}\text{Bi}_2\text{Te}_4$ в приложенном магнитном поле. Для этого использовался метод криогенной магнитно-силовой микроскопии. Таким образом, были получены карты магнитного сигнала для $\text{Ge}_{0,4}\text{Mn}_{0,6}\text{Bi}_2\text{Te}_4$ при различных полях, температурах и расстояниях до образца. Анализ данных показал, что образец претерпевает поверхностный и объемный спин-флоп переходы. Причем для поверхностного перехода было получено разное поле перехода в зависимости от окончания домена - направления намагниченности верхнего слоя, что не описывается теоретическими моделями [7], [8]. Ранее считалось, что поверхностный спин-флоп переход для окончания, верхний слой которого сонаправлен с внешним полем, не выгоден. Исследование вблизи поля этого перехода показало образование сильной стабильной во времени флуктуационной фазы, которая не наблюдалась ранее. В ходе дальнейшего анализа полученных данных были обнаружены домены, предположительно имеющие различную внутрислойную компоненту неелевского вектора.

В рамках квантовой модели Гейзенберга было проведено моделирование объемных и поверхностных свойств исследуемого антиферромагнетика. В результате удалось воспроизвести объемные свойства $\text{Ge}_{0,4}\text{Mn}_{0,6}\text{Bi}_2\text{Te}_4$. Результаты моделирования поверхностных свойств смогли описать часть обнаруженных эффектов.

Цели и задачи работы.

Целью работы является: Исследование поведения магнитных доменов антиферромагнитного топологического изолятора $\text{Ge}_x\text{Mn}_{1-x}\text{Bi}_2\text{Te}_4$.

Для достижения цели были поставлены следующие задачи:

1. Изучить литературу по теме спин-флоп переходов и топологических изоляторов.
2. Провести эксперимент на криогенном магнитно-силовом микроскопе.
3. Проанализировать и обработать карты магнитного сигнала, получить поля переходов.
4. Провести моделирование магнитных свойств изучаемого образца.

Методология и методы исследования. Для проведения исследований и решения поставленных задач использовались следующие методы: криогенная магнитно-силовая микроскопия и атомно-силовая микроскопия, магнитное моделирование объемных и поверхностных свойств антиферромагнетика в рамках модели Гейзенберга.

Личный вклад автора.

Автор участвовал в эксперименте магнитно-силовой микроскопии, обрабатывал и анализировал полученные данные, систематизировал их, занимался изучением научной литературы и проводил магнитное моделирование.

Структура и объем ВКР.

ВКР состоит из введения, обзора литературных данных (1 глава), описания метода исследования (2 глава), обсуждения полученных результатов и описания хода эксперимента (3 глава), заключения, благодарности и библиографии. Общий объем диплома составляет 49 страниц, включая 34 рисунка. Библиография включает 21 наименование на 2 страницах.

Глава 1

Литературный обзор

1.1. О роли топологии

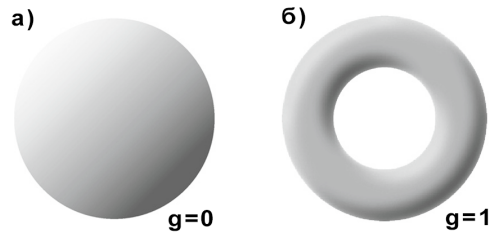


Рис. 1.1. Трехмерные объекты с различной топологией, определенной количеством отверстий.

Топология - это раздел математики, который изучает свойства классов объектов, объединенных общим инвариантом, неизменным при непрерывных деформациях. Оно сохраняется при любых непрерывных деформациях. Идея заключается в том, что определив топологию зонной структуры, можно описать электронные свойства твердых тел, которые не будут нарушаться от возмущений или дефектов, пока сохраняется некий инвариант. В случае нарушения инварианта в такой системе произойдет фазовый переход. В качестве примера такой системы и ее инварианта может выступать количество отверстий в трехмерных объектах (рис.1.1). Действительно, сфера не может быть непрерывно продеформирована в тор, но она может быть продеформирована в куб, что делает их топологически эквивалентными в смысле количества отверстий. А значит свойства зависящие от количества отверстий будут сохраняться. Соответственно, и в электронной структуре, если мы найдем некий целочисленный инвариант, мы сможем говорить о топологически неэквивалентных состояниях. То есть, о таких, которые нельзя непрерывно продеформировать друг в друга.

Выбор топологического инварианта - сложная математическая задача. К примеру, целочисленным топологическим инвариантом будет Эйлерова характеристика χ . По теореме Гаусса-Бонне интеграл от кривизны Гаусса κ по поверхности равен:

$$\int_M \kappa dA = 2\pi\chi = 2\pi(2 - 2g) \quad (1.1)$$

Здесь g - число «ручек» или, что аналогично, количество отверстий (рис.1.1).

В топологических изоляторах, к примеру, присутствует симметрия относительно обращения времени, и используется инвариант Z_2 , который связан с инверсией состояний потолка валентной зоны и дна зоны проводимости.

1.2. Топологические и магнитные топологические изоляторы

1.2.1. Топологический изолятор

Топологические изоляторы (ТИ) представляют интерес за счет необычной электронной структуры, а так же других эффектов. Они имеют щель в зонном спектре для объемных состояний, в то время как для поверхностных реализуются металлические спинполяризованные состояния с линейным законом дисперсии - конусом Дирака.

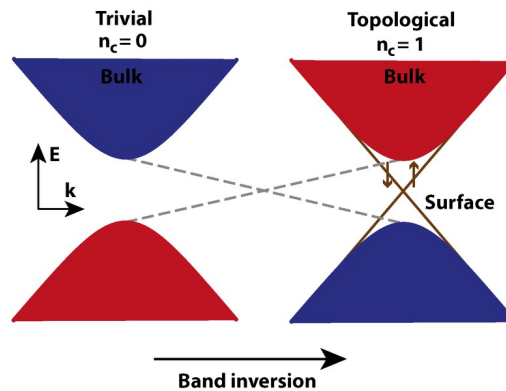


Рис. 1.2. Схематичная иллюстрация инверсии зон в точке Дирака и образования топологических состояний.

Будем считать эквивалентными топологические изоляторы, у которых запрещенная зона не будет закрываться при непрерывном изменении его гамильтониана. То есть, они будут продолжать оставаться изоляторами. Соответственно, при попытке непрерывно перевести топологически изоляторы из разных классов друг в друга в какой-то момент система должна будет перейти в металлическое состояние. Обычные изоляторы называют тривиальными. Им свойственна запрещенная зона $E_g > 0$. В свою очередь топологические изоляторы обладают инвертированным порядком. К примеру, за счет сильного спин-орбитального взаимодействия на дне зоны проводимости оказываются электроны из валентной зоны и наоборот. При этом наблюдается щель величина, которой как будто бы $E_g < 0$.

Таким образом на границе топологического и тривиального (к примеру, вакуум) изоляторов будут наблюдаться металлические состояния. Стоит отметить, что суще-

ствование этих состояний определяется объемными свойствами. Благодаря тому они - топологические поверхностные состояния обладают топологической защищенностью. Они будут существовать, пока существует отличие в классах контактирующих изоляторов.

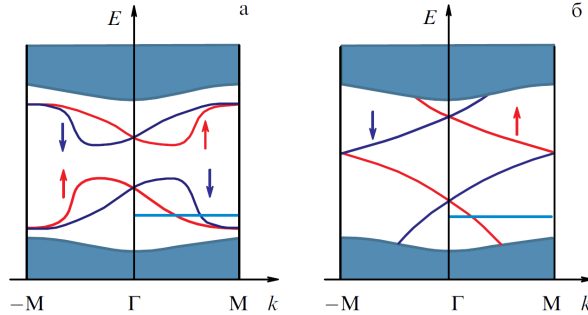


Рис. 1.3. а) Обычное поверхностное состояние тривиального диэлектрика. б) Топологическое поверхностное состояние. В первом случае количество пересечений зонного спектра с уровнем Ферми, как и с любой другой изоэнергитической линией будет четным. Во втором случае - нечетным.

Важную роль для части ТИ в образовании топологического поверхностного состояния (ТПС) играет симметрия относительно обращения времени. Для подобных материалов был предложен топологический инвариант Z_2 [9]. Группа Z_2 состоит из двух элементов - 0 и 1 [10]. Изоляторы с сохранением симметрии относительно обращения времени можно делят на две категории: - топологически тривиальный изолятор с инвариантом $Z_2 = 0$, у которого поверхностные состояния пересекаются с уровнем Ферми четное число раз (Рис.1.3); и топологический изолятор с инвариантом $Z_2 = 1$, в котором поверхностные состояния пересекаются с уровнем Ферми нечетное число раз.

Поверхностные ТИ состоят из двух хиральных состояний, у которых направление спина зависит от направления волнового вектора. То есть, токи, текущие в разные стороны, будут иметь разное направление спина.

Фаза Берри

Рассмотрим квантово-механическую систему в которой гамильтониан H зависит от нескольких параметров $\mathbf{R} = (R_1, R_2, \dots, R_N)$.

параметры гамильтониана $R(t)$. При том, будут изменяться собственные функции и собственные значения энергии, а также, в общем случае и фазовый множитель волновой функции. Но состояние системы, то есть n , не меняется.

$$|\psi_n(t=0)\rangle = |n_{R(0)}\rangle \quad (1.2)$$

$$|\psi_n(t)\rangle = C_n(t) \exp\left(-i \int_0^t E_{n,\mathbf{R}(t')} dt'\right) |n_{R(t)}\rangle \quad (1.3)$$

Здесь нами вынесен стандартный множитель $\exp\left(-i \int_0^t E_{n,\mathbf{R}(t')} dt'\right)$

$$-i \int_0^t E_{n,\mathbf{R}(t')} dt' \quad (1.4)$$

Подставим (1.3) в уравнение Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial |\psi_n(t)\rangle}{\partial t} = E_{n,\mathbf{R}(t)} |\psi_n(t)\rangle \quad (1.5)$$

Считая, что энергия искомого состояния должна быть равна 0, получим:

$$\dot{C}_n(t) |n_{R(t)}\rangle + C_n(t) \frac{\partial}{\partial t} |n_{R(t)}\rangle = 0 \quad (1.6)$$

Отсюда получаем:

$$\dot{C}_n(t) = -C_n(t) \left\langle n_{\mathbf{R}(t)} \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| n_{\mathbf{R}(t)} \right\rangle \quad (1.7)$$

Учитывая начальное условие (1.2) получаем:

$$C_n(t) = \exp\left(-\int_0^t \left\langle n_{\mathbf{R}(t')} \left| \frac{\partial}{\partial t'} \right| n_{\mathbf{R}(t')} \right\rangle dt'\right) \quad (1.8)$$

Величину $\gamma_n(t) = i \int_0^t \langle n_{\mathbf{R}(t')} | \frac{\partial}{\partial t'} | n_{\mathbf{R}(t')} \rangle dt'$ называют **фазой Берри**. С ней решение принимает следующий вид:

$$|\psi_n(t)\rangle = \exp(i\gamma_n(t)) \exp\left(-i \int_0^t E_{n,\mathbf{R}(t')} dt'\right) |n_{R(t)}\rangle \quad (1.9)$$

Фаза Берри позволяет определить точку в зоне Бриллюэна, в которой происходит инверсия зон.

1.2.2. Магнитный топологический изолятор

Появление магнитных примесей в топологическом изоляторе приводит к нарушению симметрии относительно обращения времени и, как следствие, к открытию энергетической запрещенной зоны в спектре поверхностных состояний в точке Дирака. Для этого важно наличие магнитного порядка. В случае вещества, исследуемого в работе -

антиферромагнитного. На открытие энергетической запрещенной зоны (ЭЗЗ) в зонном спектре влияет именно магнитный момент направленный перпендикулярно плоскости образца. В случае магнитного момента, направленного вдоль поверхности образца, происходит лишь параллельный сдвиг топологического поверхностного состояния вдоль волнового вектора.

Гамильтониан системы с магнитным моментом, направленным вдоль оси z , будет иметь вид:

$$\mathcal{H} = \hbar v_F (-k_y \sigma_x + k_x \sigma_y) + m \sigma_z \quad (1.10)$$

Здесь σ_i - матрицы Паули, v_F - скорость Ферми, m эффективная масса.

Решение для такого гамильтониана имеет вид:

$$E(k) \sim \sqrt{|\hbar v_F k|^2 + m^2} \quad (1.11)$$

При этом открывается щель в точке Дирака пропорциональная $2|m|$. А $E(k)$ асимптотически стремится к конусу.

Модель Su-Schrieffer-Heeger для 1D топологического изолятора

В качестве простого примера ТИ рассмотрим одномерную модель полиацетилена [11].

Рассмотрим одномерную цепочку N из атомов (рис.1.4). Рассмотрим систему в приближении сильной связи, прыжки между ближайшими соседями будут чередоваться. Обозначим их как t_1 и t_2 . Где t_1 - перескок между атомами внутри ячейки, а t_2 а между соседними атомами из разных ячеек. Логично, что перескок внутри ячейки будет более вероятен $t_1 > t_2$.

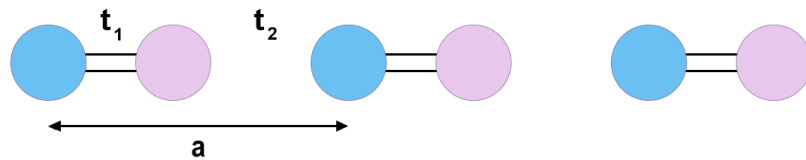


Рис. 1.4. Одномерная цепочка атомов.

$$\hat{H} = \sum_i (|2i-1\rangle \langle 2i| + t_2 |2i\rangle \langle 2i+1| + h.c.) \quad (1.12)$$

Переобозначим состояния на разных атомах: $\langle 2n-1|$, как $\langle n, 1|$, а $\langle 2n|$, как $\langle n, 2|$.

$$\hat{H} = \sum_i (|n, 1\rangle \langle n, 2| + t_2 |n, 2\rangle \langle n+1, 1| + h.c.) \quad (1.13)$$

$$\langle k, \alpha| = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n \langle n, \alpha| \exp(-ikna) \quad (1.14)$$

$$\langle n, \alpha| = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \langle k, \alpha| \exp(ikna) \quad (1.15)$$

Здесь a - длина ячейки, $L = Na$ - длина всей цепочки, k принадлежит первой зоне Бриллюэна.

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_k |k, 1\rangle \langle k, 2| + t_2 \exp(-ika) |k, 2\rangle \langle k, 1| + h.c. \\ &= \sum_k (|k, 1\rangle \langle k, 2|) \begin{pmatrix} 0 & t_1 + t_2 \exp(-ika) \\ t_1 + t_2 \exp(ika) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |k, 1\rangle \\ |k, 2\rangle \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.16)$$

$$\begin{pmatrix} 0 & t_1 + t_2 \exp(-ika) \\ t_1 + t_2 \exp(ika) & 0 \end{pmatrix} = (t_1 + t_2 \cos(ka)) \hat{\sigma}_x + t_2 \sin(ka) \hat{\sigma}_y = \mathbf{d}(k) \hat{\sigma} \quad (1.17)$$

Здесь $\hat{\sigma}_i$ - матрицы Паули, $\hat{\sigma}$ - оператор псевдоспина, вектор $\mathbf{d}(k) = \begin{pmatrix} t_1 + t_2 \cos(ka) \\ t_2 \sin(ka) \end{pmatrix}$ - аналог зеемановского вклада.

Получим решение:

$$\varepsilon(k) = \pm |\mathbf{d}(k)| = \pm \sqrt{t_1^2 + t_2^2 + 2t_1 t_2 \cos(ka)} \quad (1.18)$$

Соответственно, видим, что при некоторых значениях t_1 и t_2 мы получаем состояние с нулевой энергией.

Хиральная симметрия

Если существует унитарный оператор \hat{A} , который антикоммутирует с гамильтонианом системы, то в ней присутствует хиральная симметрия:

$$\{\hat{A}, \hat{H}\}, \hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle \implies \hat{H} \hat{A} |\psi\rangle = -E \hat{A} |\psi\rangle \quad (1.19)$$

То есть, будет существовать хиральный двойник с энергией $-E$. Таковым унитарным оператором является $\hat{\sigma} \otimes \hat{I}$.

Для хиральной симметрии не важны конкретные значения t_1 и t_2 , а только тот факт, что прыжки происходят только между соседями. Таким образом, она будет устойчива к беспорядку в значениях амплитуд перескоков.

Таким образом, мы получили, что в одномерном случае в изоляторе возникает нетривиальное топологическое состояние с нулевой энергией. Они обладают топологической защитой: если существует состояние с энергией E , то должен возникнуть хиральный двойник с энергией $-E$. Он должен локализоваться на противоположном конце цепочки. Состояния могли бы разрушиться из-за гибридизации и уйти с нулевой энергии, однако в объеме состояний на нулевой энергии нет, ибо мы имеем дело с изолятором, а краевые состояния - расположенные на противоположных краях, будут перекрываться экспоненциально слабо. Соответственно, будет происходить лишь незначительное расщепление мод. (По этой причине для существования ТПС необходимо иметь несколько монослоев.)

Теперь рассмотрим полубесконечную цепочку. Для нее мы сразу можем использовать хиральную симметрию и искать решение в виде линейной комбинации:

$$\frac{1}{2}(1 \pm \hat{\sigma} \otimes \hat{I}) |\psi\rangle \quad (1.20)$$

Эти операторы проектируют решение на соответствующие подрешетки. Поэтому уравнения разделятся по индексам подрешеток:

$$\begin{cases} t_1\psi_1 + t_2\psi_3 = 0 \\ t_1\psi_3 + t_2\psi_5 = 0 \\ t_1\psi_5 + t_2\psi_7 = 0 \\ \dots \end{cases} \implies \psi_{2k+1} = \left(-\frac{t_1}{t_2}\right)\psi_{2k-1} = \left(-\frac{t_1}{t_2}\right)^k \psi_1 \quad (1.21)$$

Эта волновая функция экспоненциально затухает в объеме при $|t_1| < |t_2|$. Как можно видеть из этого решения, ТПС будет не чувствительно к дефектам, которые не нарушают хиральную симметрию. Даже если в каких то ячейках будет нарушаться условие $|t_1| < |t_2|$, всеравно объемные свойства не дадут разрушить нетривиальное состояние. Таким образом, можно говорить о топологической защищенности краевых состояний.

1.3. Антиферромагнетик в магнитном поле

Когда антиферромагнетик (АФМ) помещается в магнитное поле, оно начинает влиять на направление магнитных подрешеток. Здесь будет рассматриваться простой двухподрешеточный АФМ а-типа, то есть, у которого направление намагниченности меняется послойно.

При направлении поля вдоль направления магнитных моментов подрешеток двух-подрешеточный антиферромагнетик может претерпеть спин-флоп переход. Чтобы его пронаблюдать необходимо, чтобы в материал удовлетворял условиям на магнитную анизотропию и обменные константы. При этом подрешетки АФМ меняют свои направления, что приводит к возникновению ненулевой намагниченности вдоль легкой оси. Этот переход может произойти в объеме кристалла и, при определенных параметрах материала, так же на его поверхности.

1.3.1. Объемный спин-флоп эффект

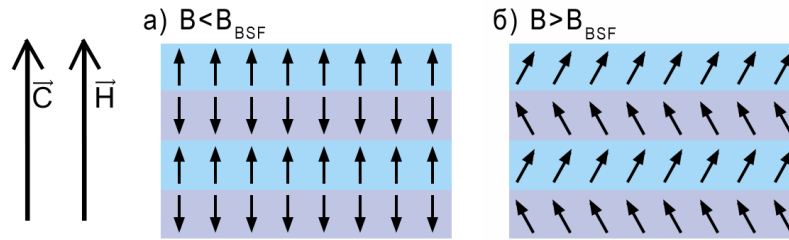


Рис. 1.5. Схематическая иллюстрация объемного спин-флоп эффекта: а) четыре слоя в антиферромагнитном состоянии ниже поля перехода б) четыре слоя выше поля перехода - в спин-флоп фазе.

Смысл объемного спин-флоп (BSF) эффекта заключается в том, что при повышении поля выше B_{BSF} происходит переход в другое состояние (рис.1.5). В нем магнитные моменты подрешеток имеют равные углы с легкой осью намагниченности. Это можно описать энергетическим образом [12]. Запишем энергию антиферромагнетика во внешнем поле:

$$E = -MB\cos(\theta) - MB\cos(\phi) + AM^2\cos(\theta + \psi) - \frac{1}{2}\Delta(\cos^2(\theta) + \cos^2(\psi)) \quad (1.22)$$

Здесь ψ и θ - углы подрешеток с легкой осью анизотропии, M - намагниченность подрешеток, Δ - константа анизотропии. Соответственно, энергия антиферромагнитного и спин-флоп состояния будут равны:

$$E_{AF} = -AM^2 - \Delta \quad (1.23)$$

$$E_{BSF} = -2MB\cos(\theta) + AM^2\cos(2\theta) - \Delta(\cos^2(\theta)) \quad (1.24)$$

Путем минимизации энергии спин-флоп состояния по углу мы можем получить энергию при заданном внешнем магнитном поле B .

$$E_{BSF} = -AM^2 - \frac{M^2 B^2}{2AM^2 - \Delta} \quad (1.25)$$

Соответственно, спин-флоп состояние окажется энергетически выгоднее при полях выше поля:

$$B_{BSF} = \sqrt{2A\Delta - \left(\frac{\Delta}{M}\right)^2} \quad (1.26)$$

При дальнейшем повышении поля магнитные моменты подрешеток разворачиваются в сторону легкой оси, пока не станут ей параллельны. Это происходит при поле:

$$B_1 = 2AM - \left(\frac{\Delta}{M}\right) \quad (1.27)$$

Спин-флоп состояния может не быть, если $B_{BSF} > B_1$, то есть, система сразу выстраивается по полю. Это называется спин-флип переход:

$$\sqrt{2A\Delta - \left(\frac{\Delta}{M}\right)^2} > 2AM - \left(\frac{\Delta}{M}\right) \quad (1.28)$$

Отсюда имеем, что при $\Delta > AM^2$ спин-флоп перехода не будет. Соответственно, анизотропия должна быть мала.

1.3.2. Поверхностный спин-флоп эффект

Поверхностный спин-флоп (SSF) эффект был теоретически исследован в 1968 [7]. Рассматривался полубесконечный антиферромагнетик в приближении ближайших соседей. В случае рассмотрения поверхности важно, какой именно слой будет верхним: направленный против поля или параллельно ему. В модели ближайших соседей последний случай будет эквивалентен объемному, так как верхнему слою будет не выгодно менять свое направление.

Аналогично записываем энергию:

$$\begin{aligned} E = & -\frac{\Delta}{2} \sum_{l=0}^{\infty} \left(\cos^2(\alpha_{2l}) + \cos^2(\beta_{2l+1}) \right) + \\ & + \frac{AM^2}{2} \sum_{l=0}^{\infty} \left(\cos(\alpha_{2l} - \beta_{2l+1}) + (1 - \delta_{l,0}) \cos(\alpha_{2l} - \beta_{2l-1}) \right) - MB \sum_{l=0}^{\infty} \left(\cos(\alpha_{2l}) + \cos(\beta_{2l+1}) \right) \end{aligned} \quad (1.29)$$

Здесь α_{2l} и β_{2l+1} - углы с легкой осью намагничивания для соответствующих подрешеток для каждого слоя. Далее аналогично объемному случаю минимизируем энергию по углам:

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha_{2l}} = \frac{\partial E}{\partial \beta_{2l+1}} = 0 \quad (1.30)$$

Далее предполагаем, что $\Delta \ll BM \ll AM^2$ и получаем:

$$E_{SSF} - E_{AF} = \frac{\Delta A - B^2}{B} \quad (1.31)$$

Таким образом, $B_{SSF} = \sqrt{A\Delta}$. Сравним это с полем объемного спин-флоп эффекта с учетом выше указанного предположения:

$$B_{BSF} = \sqrt{2A\Delta - \left(\frac{\Delta}{M}\right)^2} \approx \sqrt{2A\Delta} = \sqrt{2}B_{SSF} \quad (1.32)$$

Таким образом, теоретически ожидается, что в случае, если верхний слой антипараллелен внешнему магнитному полю, то при поле $B_{SSF} = \frac{B_{BSF}}{\sqrt{2}}$ произойдет поверхностный спин-флоп эффект. В другом случае отличие поведения поверхности от объема не ожидалось.

1.4. Топологический изолятор $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$

Первым экспериментально обнаруженным трехмерным ТИ является соединение $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$. Он был исследован методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ФЭСУР) [13].

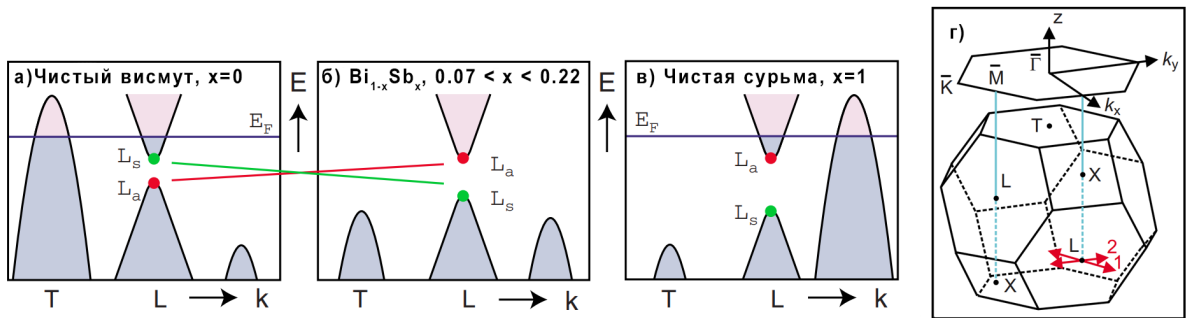


Рис. 1.6. а-в) Схематическая зависимость зонной структуры $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ в зависимости от концентрации Sb. г) Схематическое изображение трехмерной зоны Бриллюэна и ее проекция на плоскость (111).

Чистый висмут обладает сильным спин-орбитальным взаимодействием. Его зонная структура схематично показана на рис.1.6а. Перекрывающиеся зоны проводимости и валентности приводят к скоплениям дырок вблизи точки T в зоне Бриллюэна и скоплениям электронов вблизи трех эквивалентных точек L . Эти точки зоны Бриллюэна помечены на рис.1.6г. L - центр бокового шестиугольника, T - центр верхнего шестиугольника.

Замена висмута сурьмой изменяет вид зонной структуры (рис.1.6б). При концентрации Sb равной $x = 0.04$, щель Δ между L_a и L_s закрывается. В момент закрытия зазора реализуется ситуация, аналогичная той, что происходит на границе ТИ - образуется безмассовая трехмерная точка Дирака, но во всем образце. При дальнейшем увеличении x щель Δ снова увеличивается с инвертированным порядком, как будто бы " $\Delta < 0$ ". При $x = 0,07$ верхняя часть валентной зоны в точке T перемещается ниже нижней части зоны проводимости в точке L . Начиная с этого момента материал становится изолятором. Как только зона в точке T опускается ниже валентной зоны в точке L , что происходит при $x = 0.09$, материал становится прямозонным изолятором (рис. 1.6б).

При дальнейшем увеличении x валентная зона и зона проводимости остаются разделены щелью Δ . При $x = 0.22$ валентная зона в другой точке поднимается над зоной проводимости, таким образом, материал снова переходит в полуметаллическое состояние (рис.1.6в). В чистом состоянии и висмут, и сурьма являются изоляторами. Соответственно, их валентные зоны могут быть топологически классифицированы. Предполагалось, что Bi относится к тривиальному Z_2 классу $(0;000)$, в то время как Sb относится к $(1;111)$. Предполагалось, что сплав $Be_{1-x}Sb_x$ унаследует от Sb класс инвариантности.

На рисунке 1.7 показан спектр полученный методом ФЭСУР. Точками 1 и 2 помечены линии соответствующие ТПС. Зона Бриллюэна, соответствующая $Be_{1-x}Sb_x$ указана на рисунке 1.6.г.

1.5. Топологические изоляторы типа A_2B_3 ($A = Bi/Sb$, $B = Te$)

Далее было теоретически [14] и экспериментально изучено семейство ТИ типа A_2B_3 ($A = Bi/Sb$ и $B = Te$). Они имеют ромбоэдрическую кристаллическую структуру. Структура поверхности таких материалов была проще, чем у $Bi_{1-x}Sb_x$, и они имели большую ширину запрещенной зоны. A_2B_3 состоит из 5-ти атомных блоков, которые связаны между собой при помощи сил Ван-дер-Ваальса.

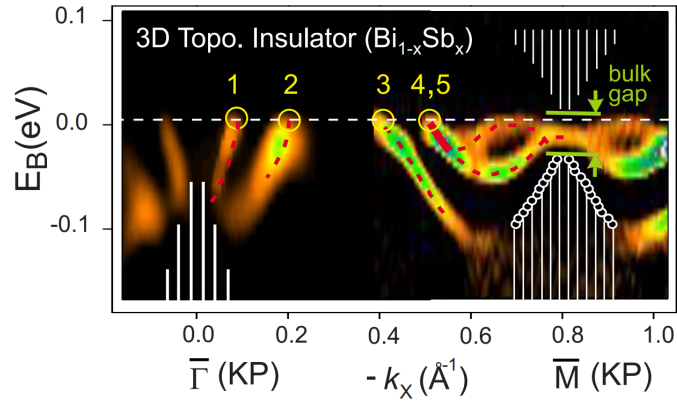


Рис. 1.7. ФЭСУР измерения зонной структуры $\text{Ve}_{0.91}\text{Sb}_{0.09}$.

Теоретические расчеты в показали наличие конуса Дирака у этих материалов (Рис. 1.8). Ожидалось, что Sb_2Se_3 тоже будет иметь топологические поверхностные состояния. На рисунке 1.8 представлены рассчитанные зонные структуры для данных материалов. Красным цветом здесь отмечены зоны. Мы видим ТПС у всех перечисленных материалов, кроме Sb_2Se_3 , которого для теоретические расчеты их не показали. Для остальных веществ экспериментально было показано наличие конуса Дирака. В работе [15] для Bi_2Se_3 и Bi_2Te_3 и работе [16] для Sb_2Te_3 .

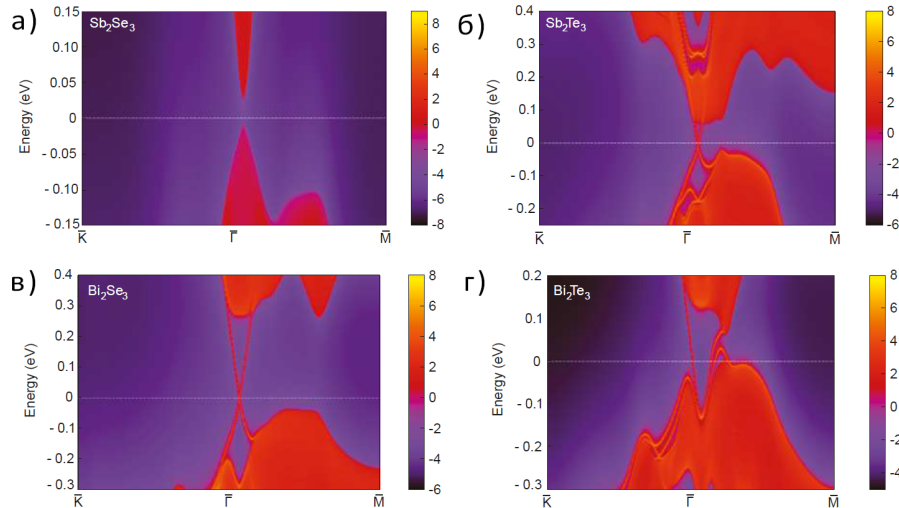


Рис. 1.8. Рассчитанная зонная структура для следующих материалов а) Sb_2Se_3 , б) Sb_2Te_3 , в) Bi_2Se_3 и г) Bi_2Te_3 . Красному цвету соответствуют зоны, синему - ее отсутствие.

Топологичность этих материалов связано с инверсией зон при $\mathbf{k} = 0$, то есть, они имеют топологический класс $(1, 000)$. Отличие класса $(1, 000)$ от $(1, 111)$ в $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ в том, что он является сильным топологическим инвариантом.

1.6. Магнитный топологический изолятор $(\text{Mn}, \text{Ge})\text{Bi}_2\text{Te}_4$

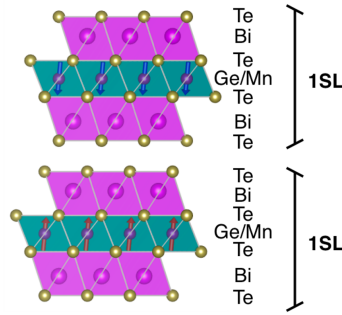


Рис. 1.9. Структура $(\text{Ge}, \text{Mn})\text{Bi}_2\text{Te}_4$.

MnBi_2Te_4 - первый обнаруженный собственный топологический изолятор. Это было показано в 2019 году в работе [2]. Соответственно у него имеется запрещенная зона в поверхностных состояниях, которая обусловлена магнитной природой. Об этом можно судить по результатам измерений ФЭСУР и расчетам в теории функционала электронной плотности. Температура Нееля для MnBi_2Te_4 составляет 24.5К. На рис.1.10 видно, что щель в точке Дирака закрывается выше 24.5К, что сигнализирует о том, что она обусловлена наличием в системе антиферромагнитного порядка.

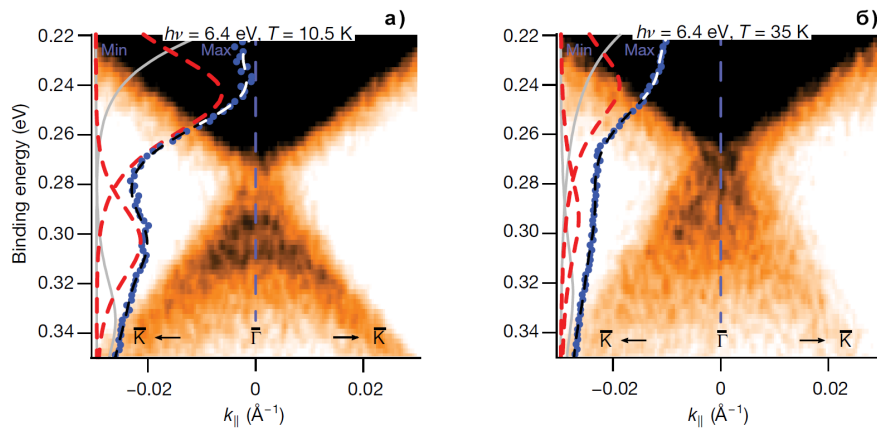


Рис. 1.10. Увеличенная область ФЭСУР точки Дирака для MnBi_2Te_4 : а) Ниже температуры Нееля; б) Выше температуры Нееля.

MnBi_2Te_4 является блочным Ван-дер-Ваальсовым кристаллом. Что означает низкое взаимодействие между слоями. Кристалл состоит из семиатомных блоков (SL) (рис.1.9). В центре пакетов расположены атомы Mn, магнитные моменты которых упорядочены ферромагнитно внутри слоя и антиферромагнитно – между слоями. То есть, кристалл является антиферромагнетиком А-типа.

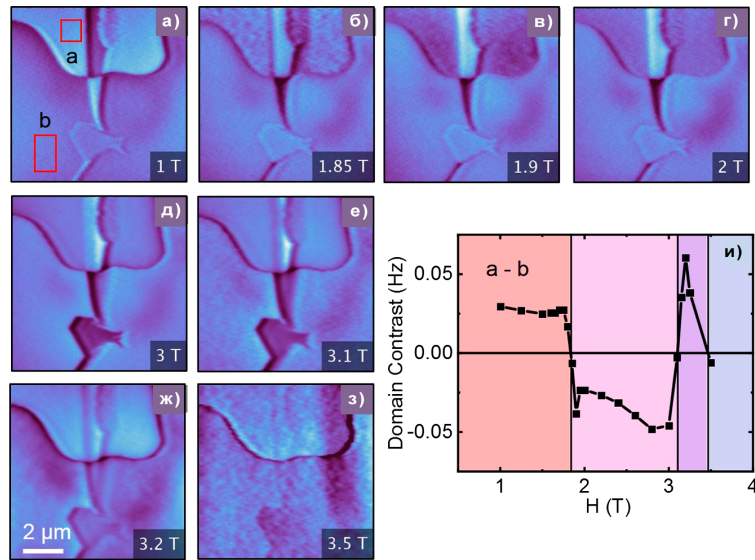


Рис. 1.11. а-з) Карты магнитного сигнала для MnBi_2Te_4 ; и) Доменный контраст в зависимости от приложенного магнитного поля. Места, между которыми измерялся контраст помечены красными рамками на рисунке а).

Были проведены исследования динамики доменов во внешнем магнитном поле для MnBi_2Te_4 методом криогенной магнитно-силовой микроскопии [6]. Он оказался первым естественным антиферромагнетиком, который претерпевает поверхностный спин-флоп переход. Были получены карты магнитного сигнала для диапазона полей 1.0 – 3.5Тл (рис.1.11). На рис.1.11 более яркие участки указывают на окончание с намагниченностью противоположной внешнему магнитному полю. То есть, верхний слой антипаралелен полю. Этот случай обозначен буквой «а» на рис.1.11.а. Соответственно, более темные участки указывают на окончание с параллельной намагниченностью, обозначенной как «b» на рис.1.11.а. В поле приблизительно 1.85Тл на окончании «а» появляются особенности. Сигнал окончания «b» при этом практически не изменяется. Это сигнализирует о том, что окончание «а» претерпело SSF переход при поле $H_{SSF_a} \approx 1.85\text{Тл}$. Аналогичный переход происходит для окончания «b» в поле $H_{SSF_b} \approx 3.1\text{Тл}$. При поле $H_{BSF} \approx 3.5\text{Тл}$ пропадает контраст между окончаниями, что сигнализирует об объемном спин-флоп переходе. На рис.1.11и показана разница магнитного сигнала между окончаниями. Области, по которым проводилось усреднение, указаны на рис.1.11а красными рамками.

Факт, что окончание «b» претерпела SSF переход был неожиданным, так как такого не наблюдалось ранее [8].

Так же для этого кристалла было проведено исследование методом СКВИД-магнитометрии [17]. Получено, что поле насыщения вдоль кристаллографической оси c $H_c = 8,1$ Тл, поле насыщения вдоль плоскости, образованной осями a и b , $H_{ab} = 10,9$ Тл, поле объемного спин-флоп перехода $H_{BSF} = 3.7$ Тл и температура Нееля $T_N = 25$ К. Эти данные будут нужны для моделирования магнитных свойств следующей системы.

Далее стали проводиться исследования влияния добавления Ge в этот кристалл [18]. Формула получившегося вещества - $\text{Ge}_x\text{Mn}_{1-x}\text{Bi}_2\text{Te}_4$.

В диссертации [19] были измерены магнитные свойства кристаллов $\text{Ge}_x\text{Mn}_{1-x}\text{Bi}_2\text{Te}_4$ параллельно кристаллографической оси c (100). Используя метод СКВИД-магнитометрии были измерены температурные зависимости намагниченности в разных полях. Полученная зависимость температуры Нееля от концентрации Ge в образце - и приведена на рисунке 1.12.а. Так же в работе были приведены измерения полей насыщения вдоль кристаллографической оси c и поля объемного спин-флоп перехода. На рисунке 1.12.б синим приведена зависимость поля насыщения вдоль оси c H_c от концентрации Ge, а черным поля объемного спин-флоп перехода. Так же приведены соответствующие аппроксимирующие зависимости. Видим близкую к линейной зависимость температуры Нееля. В работе сделан вывод, что это происходит за счет уменьшения констант обменного взаимодействия между слоями. Другим выводом в том, что по мере роста концентрации германия возможна тенденция к уменьшению магнитной анизотропии. В целом, видим, что замена части атомов Mn на Ge приводит к разбавлению магнитной подрешетки.

В работе исследуются кристаллы из семейства $\text{Ge}_x\text{Mn}_{1-x}\text{Bi}_2\text{Te}_4$. Они являются твердыми растворами GeBi_2Te_4 в MnBi_2Te_4 .

Кристаллы $\text{Ge}_x\text{Mn}_{1-x}\text{Bi}_2\text{Te}_4$ исследуемые в данной работе были изготовлены в МГУ выращиванием из расплава методом Бриджмена.

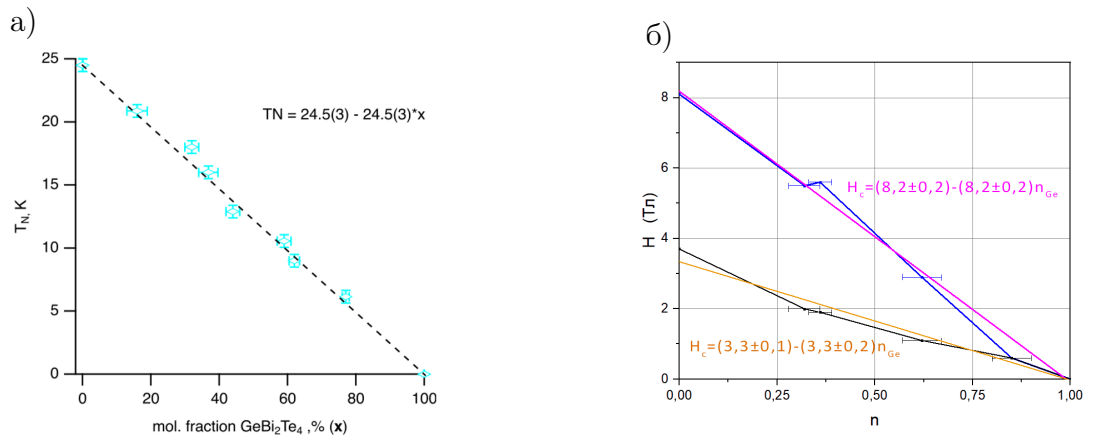


Рис. 1.12. а) Зависимость температуры Нееля для $\text{Ge}_x\text{Mn}_{1-x}\text{Bi}_2\text{Te}_4$ в зависимости от концентрации Ge. б) Зависимость поля насыщения вдоль оси с от концентрации Ge (синий) и поля объемного спин-флоп перехода (черный). Так же на графике приведены соответствующие аппроксимирующие функции.

Глава 2

Экспериментальные методы

2.1. Криогенная магнитно-силовая микроскопия

Магнитно-силовая микроскопия (МСМ) позволяет исследовать локальные магнитные свойства образца на всей области сканирования. Основная идея метода сканирующего зондового микроскопа заключается в том, чтобы исследовать образец за счет взаимодействия зонда и поверхности образца [20]. Зонд проходит по указанной области сканирования образца (Рис. 2.1) и получает данные взаимодействия в сетке точек. Как показано на рисунке 2.1 есть быстрая ось сканирования (отмечена красным) и медленная ось (отмечена синим). Движение по ним осуществляется последовательно. То есть, сначала зонд проводит сканирование вдоль быстрой оси, а после смещается вдоль медленной.

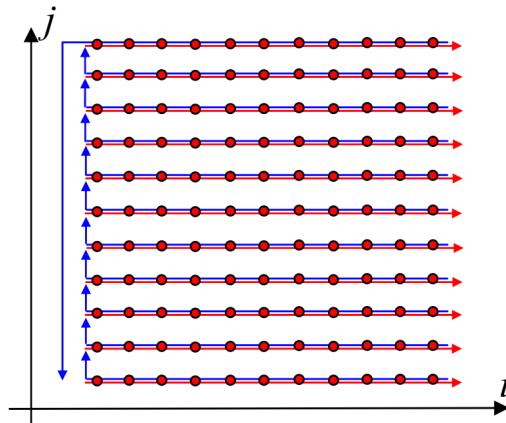


Рис. 2.1. Схематическое изображение движения зонда в процессе сканирования. Направление прямого хода сканера обозначено стрелками красного цвета, а обратный ход сканера обозначен синим цветом. Регистрация информации производится в точках на прямом проходе.

В общем случае зондовые методы не ограничиваются магнитно-силовой микроскопией. В качестве регистрируемого сигнала может быть туннельный ток (сканирующая туннельная микроскопия), магнитное взаимодействие (магнитно-силовая микроскопия), взаимодействие с поверхностью (атомно-силовая микроскопия) и многие другие.

Подробнее остановимся на атомно-силовой и магнитно-силовой микроскопиях. Так как оба метода используются в данной работе и имеют схожие принципы работы.

2.1.1. Атомно-силовой микроскоп

Атомно-силовой микроскоп (АСМ) регистрирует взаимодействие зонда с поверхностью плоского образца. В качестве зонда выступает упругая консоль - кантеливер с иглой на конце (Рис. 2.2). За счет взаимодействия зонда с поверхностью происходит изгиб консоли. Регистрируя величину изгиба, можно получать информацию о силе взаимодействия зонда с поверхностью.

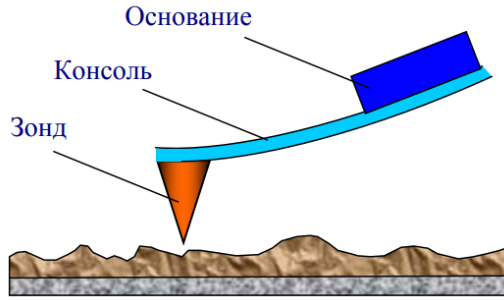


Рис. 2.2. Схематическое описание зонда атомно-силового микроскопа и исследуемой поверхности.

Энергию взаимодействия между двумя атомами на расстоянии r можно аппроксимировать потенциалом Леннарда-Джонса (Рис. 2.3):

$$U_{LD} = U_o \left(-2 \left(\frac{r_o}{r} \right)^6 + \left(\frac{r_o}{r} \right)^{12} \right) \quad (2.1)$$

Для качественного понимания работы АСМ можно рассматривать этот потенциал.

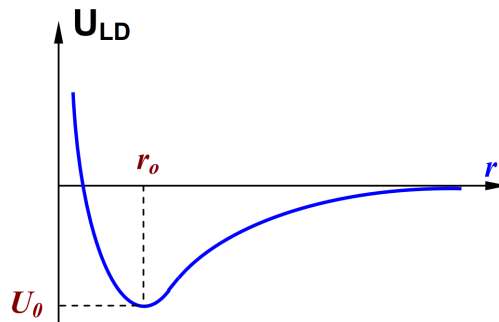


Рис. 2.3. Качественный вид потенциала Леннарда – Джонса.

Существуют разные методики работы АСМ. Среди них контактный, полуконтактный и бесконтактный методы. Для понимания принципа работы метода имеет

смысл рассмотреть первый и последний. Также в работе использовался и полуконтактный метод, поэтому далее идет описание его работы.

В контактной методике зонд находится в непосредственном соприкосновении с поверхностью. В этом случае сила упругости кантеливера уравновешена с силой притяжения, либо отталкивания образца. Таким образом, регистрируя отклонение консоли можно получать информацию о силе взаимодействия. Далее нужно получить из этого информацию о самом рельефе поверхности. Для этого используется обратная связь. Игла крепится на пьезоэлементе и в процессе сканирования сила взаимодействия поддерживается постоянной. Мы же записываем $\Delta Z(x, y)$ - величину сдвига иглы пьезоэлементом в процессе сканирования, что и будет искомым рельефом поверхности.

В бесконтактной методике зонд совершает малые вынужденные колебания на расстоянии от образца. В этом случае его поведение можно качественно описать, как поведение точечной массы на немассивной упругой консоли. Тогда мы можем записать уравнение вынужденных колебаний системы:

$$m\ddot{z} = -k(z - u) - \gamma\dot{z} + F(z) \quad (2.2)$$

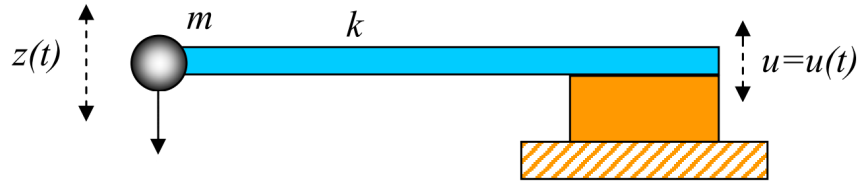


Рис. 2.4. Модельное описание вынужденных колебаний зонда на упругом кантеливере.

Где $u = u_o \cos(\omega t)$ - колебания пьезоэлемента. Силу $F(z)$ можно разложить как $F(z) = F_o + F'_z \cdot z$. Тогда будет получено следующее:

$$m\ddot{z} = -(k - F'_z)z - \gamma\dot{z} + F_o + ku_o \cos(\omega t) \quad (2.3)$$

Сделаем замену $x = z + F'_z/k$, введем добротность $Q = \omega_o m/\gamma$ и тогда уравнение упростится до:

$$\ddot{x} + \frac{\omega_o}{Q}\dot{x} + \left(\omega_o^2 - \frac{F'_z}{m}\right)x = \omega_o^2 u_o \cos(\omega t) \quad (2.4)$$

Решая это уравнение мы получаем зависимость для амплитуды колебаний - амплитудно-частотной характеристики (АЧХ):

$$A(\omega) = \frac{u_o \omega_o^2}{\sqrt{\left(\omega_o^2 - \omega^2 - \frac{F'_z}{m}\right)^2 + \frac{\omega_o^2 \omega^2}{Q^2}}} \quad (2.5)$$

А так же для фазы колебаний - фазово-частотной характеристики (ФЧХ):

$$\phi(\omega) = \arctg\left(\frac{\omega \omega_o}{Q\left(\omega_o^2 - \omega^2 - \frac{F'_z}{m}\right)}\right) \quad (2.6)$$

Из АЧХ получим смещение частоты резонанса:

$$\omega_{res,f}^2 = \omega_o^2 \left(1 - \frac{1}{2Q^2} - \frac{F'_z}{k}\right) = \omega_{res,d}^2 - \frac{F'_z}{m} \quad (2.7)$$

Где $\omega_{res,f}$ - резонансная частота с учетом силы взаимодействия, а $\omega_{res,d}$ - в свободном пространстве.

$$\Delta\omega_{res} = \omega_{res,f} - \omega_{res,d} = \omega_{res,d} \left(1 - \sqrt{1 - \frac{F'_z}{m\omega_{res,d}^2}}\right) \quad (2.8)$$

Аналогично можно получить зависимость центра ФЧХ от производной силы F'_z :

$$\omega_p = \omega_o \sqrt{1 - \frac{F'_z}{k}} \quad (2.9)$$

Как видно из этих уравнений, ФЧХ и АЧХ будут смещаться при изменении F'_z , которая зависит от расстояния.

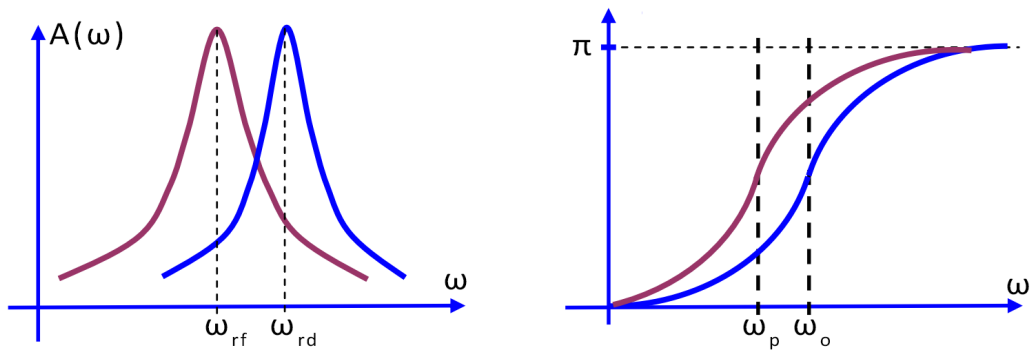


Рис. 2.5. Иллюстрация сдвига АЧХ и ФЧХ при изменении расстояния до поверхности образца.

Таким образом, аналогично контактной методике, используя обратную связь, можно получать информацию о рельефе поверхности образца $\Delta Z(x, y)$

В полуконтактной методике происходят колебания кантилевера, в результате которых он касается поверхности образца.

При проведении измерения регистрируется фаза и амплитуда колебаний зонда. В момент касания поверхности зонд упруго деформируется. Это нужно учесть. Будем рассматривать силу Ван-дер-ваальсовского взаимодействия с поверхностью и упругую деформацию в момент касания. Обозначим Z_o - расстояние от положения равновесия кантилевера до исследуемой поверхности, Z , соответственно, считается от поверхности, а через $F_{ps}(Z(t))$ - силу, в которой будет учитываться все взаимодействие. Тогда получаем уравнение движения зонда:

$$\ddot{Z} + \frac{\omega_o}{Q}\dot{Z} + \omega_o^2(Z(t) - Z_o) - u_o \cos(\omega t) = \frac{\omega_o}{k} F_{ps}(Z(t)) \quad (2.10)$$

Как видно из описания полуконтактного режима, он реализуется, если амплитуда колебаний зонда окажется больше Z_o :

$$Z_o < Qu_o \quad (2.11)$$

Как можно понять, теоретическое описание этого режима будет более сложным, так как уравнения не линейны, а сила $F_{ps}(Z(t))$ не может быть разложена в ряд по Z . В этом режиме на колебания будет существенно влиять жесткость поверхности образца. Поэтому это будет оказывать основное влияние на амплитуду и на фазу колебаний.

Рассмотрим процесс диссипации энергии, которая происходит при взаимодействии зонда и поверхности образца. Таким образом мы сможем оценить сдвиг фазы колебаний между возбуждающей силой и установившимися колебаниями системы. Энергия, поступающая в рассматриваемую систему от пьезодвигателя за один период равна:

$$E_{pm} = \int_t^{t+2\pi/\omega} ku_o \cos(\omega\tau) \frac{dZ}{d\tau} d\tau \quad (2.12)$$

Эта энергия расходуется на взаимодействие зонда с окружающей средой - E_{CA} :

$$E_{CA} = \int_t^{t+2\pi/\omega} \frac{m\omega_o}{Q} \left(\frac{dZ}{d\tau} \right)^2 d\tau \quad (2.13)$$

и на взаимодействие с образцом:

$$E_{CS} = \int_t^{t+2\pi/\omega} F_{ps}(Z) \frac{dZ}{d\tau} d\tau \quad (2.14)$$

В предположении, что колебания будут гармоническими $Z = A \cos(\omega t + \varphi)$ со сдвигом фазы φ получим:

$$E_{CS} = \frac{\pi k u_o A}{Q} \sin(\varphi) - \frac{\pi k \omega A^2}{Q \omega_o}. \quad (2.15)$$

И тогда мы можем получить уравнение для сдвига фазы:

$$\sin(\varphi) = \frac{\omega A}{\omega_o u_o} + \frac{Q E_{CS}}{\pi k u_o A} \quad (2.16)$$

Видим, что полученное выражение зависит от диссипации энергии E_{CS} за счет взаимодействия с поверхностью изучаемого образца.

Этот метод также использует обратную связь. Получение топографии поверхности происходит следующим образом. Пьезодвигатель возбуждает колебания зонда на частоте близкой к резонансной с амплитудой A_{ex} . Обратная связь стремится поддерживать колебания кантеливера на уровне A_o , меньшем A_{ex} путем измерения расстояния Z_o . Оно меняется пьезодвигателем, который отвечает за перемещения зонда вдоль оси Z . Регистрируется при этом полученная зависимость $Z(x, y)$ - топография поверхности, а также сдвиг фазы $\varphi(x, y)$. Последняя зависимость называется "Фазовый контраст".

2.1.2. Магнитно-силовая микроскопия

Принцип работы МСМ похож на АСМ. Отличие заключается в использовании зонда с нанесенным на острие ферромагнитным покрытием. За счет этого появляется дополнительное взаимодействие между зондом и образцом, которое создает градиент силы. Магнитные силы являются более дальнедействующими, чем силы взаимодействия зонда с поверхностью. Таким образом, для проведения измерений в МСМ режиме необходимо отступить от поверхности на достаточное расстояние.

В случае достаточно гладкой поверхности образца сканирование в режиме МСМ можно производить с постоянной высотой. То есть, зонд будет двигаться вдоль поверхности без обратной связи. На нашей установке AttoDRY1000 в этом режиме можно ввести компенсацию наклона. Эти измерения могут проводиться как в квазистационарном, так и в колебательном бесконтактном режиме.

Если поверхность измеряемого образца обладает высокой шероховатостью, необходимо использовать двупроходную методику. В этом случае объединяются две техники - АСМ и МСМ. Сначала вдоль быстрой оси снимается топография в контактном или полуконтактном режиме, а после, отступив от образца на ранее указанное расстояние Z_o , регистрируется магнитный сигнал. Далее это повторяется для следующей линии. Это позволяет компенсировать поверхностный вклад в сигнал, что также критично для

образцов с сильно развитой топографией. Это проиллюстрировано на рисунке 2.6. Так как оба вида сканирования (АСМ и МСМ) происходят последовательно для каждой линии, мы можем так же быть уверены, что полученные карты топографии и магнитного контраста совпадают.

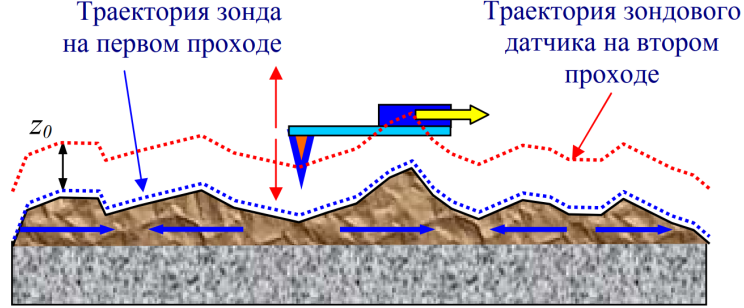


Рис. 2.6. Иллюстрация двупроходной методики. Синим отмечена траектория движения зонда при первом проходе в режиме АСМ, красным траектория в МСМ режиме.

Далее качественно опишем силу магнитного взаимодействия зонда с образцом. Для простоты будем считать зонд магнитным моментом \mathbf{m} . Поле от образца - $\mathbf{H}(\mathbf{r})$. Энергия их взаимодействия $E = -(\mathbf{m}, \mathbf{H}(\mathbf{r}))$. Зонд регистрирует силу, направленную вдоль оси z :

$$F_z = -\frac{\partial E}{\partial z} = m_x \frac{\partial H_x}{\partial z} + m_y \frac{\partial H_y}{\partial z} + m_z \frac{\partial H_z}{\partial z} \quad (2.17)$$

Измерения в МСМ часто происходят в бесконтактном режиме. Поэтому также важно указать:

$$F'_{zz} = m_x \frac{\partial^2 H_x}{\partial z^2} + m_y \frac{\partial^2 H_y}{\partial z^2} + m_z \frac{\partial^2 H_z}{\partial z^2} \quad (2.18)$$

Важно отметить следующий факт. Направление намагниченности иглы опеределает направление исследуемой компоненты намагниченности образца. В нашем случае игла намагничена вдоль оси z . Однако образец зачастую расположен под небольшим углом к плоскости xy . Поэтому в сигнал подмешивается малая часть информации о продольной намагниченности образца.

Существует оценка минимального градиента силы, которую можно почувствовать в МСМ [21]:

$$F'_z = \frac{1}{A_{ev}} \sqrt{\frac{4kk_bTD}{\omega_oQ}} \quad (2.19)$$

Здесь D – полоса пропускания детектора, A_{ev} – среднеквадратичная амплитуда колебаний кантилевера. Мы видим, что путем повышения добротности и понижения температуры мы можем значительно увеличить точность измерений. В качестве оценки можно привести значения добротности около 100 для атмосферного давления, и она повысится до 10^4 в вакууме, что дает улучшение разрешения по градиенту силы в 100 раз. Так же за счет температуры мы получаем рост около одного порядка. Тем самым использование метода криогенной магнитно-силовой микроскопии дает в ~ 1000 раз большую чувствительность, по сравнению с обычным случаем.

2.1.3. Ход эксперимента

Исследования проводились в Центре перспективных методов мезофизики и нанотехнологий МФТИ на криогенном магнитно-силовом микроскопе Attocube AttoDRY1000 (Рис. 2.7). Образец в нем находился в атмосфере гелия при давлении 5 мбар. Измерения могут проводиться при температуре до ~ 4 К, которую можно варьировать в диапазоне от 4 К до 80 К при помощи нагревателя. Так же можно дополнительно влиять на температуру путем изменения давления обменного газа внутри изолированного объема с образцом. Сверхпроводящий магнит позволяет создавать поля до 9 Тл. Так же вставка с образцом оснащена возможностью измерять транспортные свойства и подавать напряжение на сканирующий зонд. Таким образом, имеется возможность проведения исследований с широким спектром контролируемых параметров.



Рис. 2.7. Криогенный магнитно-силовой микроскоп Attocube AttoDRY1000.

Для повышения чувствительности МСМ было взято 5 мбар гелия в качестве обменного газа, вместо обычных 70 мбар. В процессе измерений использовались следующие методики: Топография образца измерялась в полуконтактном режиме АСМ. Использование этого режима обусловлено тем, что контактный режим является более

опасным для сохранности зонда, а на бесконтактный будет существенно влиять вклад от магнитных сил.

Магнитный сигнал измерялся двумя способами: двупроходной методикой и в режиме модуляции резонансной частоты на постоянной высоте. Последний способ нам был доступен, так как у нас достаточно гладкий образец. В нем нет предварительного сканирования топографии перед исследованием магнитного сигнала - только возможность ручной компенсации наклона образца. В случае нашего образца, характерная высота особенностей порядка 1 нм, а расстояние, на котором просходит измерение это $\sim 80-100$ нм. То есть, использование этого метода оправдано.

Процесс измерения

Перед каждым измерением зонд отводится от образца на небольшое безопасное расстояние. Далее изменяются свойства окружающей среды эксперимента - магнитное поле, либо температура. После чего проводятся измерения АЧХ и ФЧХ колебаний кантлевера и устанавливается частота возбуждения равная частоте резонанса. После чего зонд подводится к образцу, и запускается сканирование в выбранном режиме.

2.1.4. Обработка данных

Полученные данные были обработаны в программах Gwyddion и Igor Pro.

Работа в Gwyddeon

Gwyddeon - это сильный инструмент для визуализации и анализа изображений, полученных на зондовых микроскопах. Ниже будут приведены процедуры обработки, которые использовались в работе, а так же мотивация их применения.

Плоскость поверхности образца часто находится под углом к плоскости измерительной головки (Рис. 2.8). Интересующие нас особенности находятся в плоскости образца, поэтому для их исследования необходимо вычесть этот наклон. Проводить эту процедуру можно двумя способами: вычитанием аппроксимирующей данные плоскости, либо преобразованием поворота. Второй случай позволяет лучше сохранить размеры особенностей вдоль осей x и y , однако в нашем случае в этом не было необходимости. Мы использовали вычитание аппроксимирующей плоскости. Схематичное изображение происходящего процесса изображено на рисунке 2.8.

В силу особенности устройства пьезодвигателя, перемещающего сканирующую головку, в сигнал зачастую имеется вклад поверхности второй степени. При обработке стоит вычесть этот вклад, если он существенен.

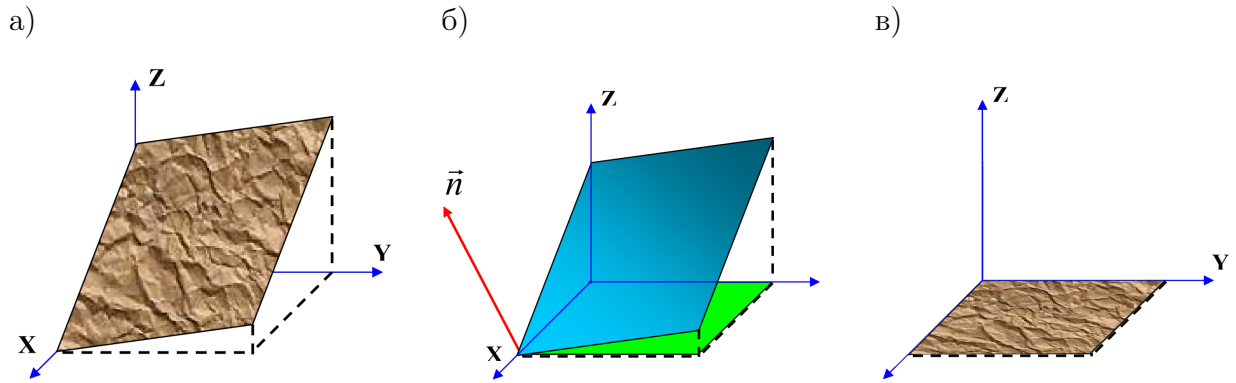


Рис. 2.8. Схематичное изображение вычитания постоянного наклона при обработке данных.

а) Данные с некомпенсированным наклоном б) Вычитаемая плоскость в) Результат обработки.

Выравнивание строк

Получение данных сканирующей зондовой микроскопии происходит по строчно. И низкочастотный шум, особенности работы двигателей и влияние внешних факторов приводят к искажениям сигнала между строками. Существует множество методов объединить эти строки в единое изображение. Мотивация выбора того или иного способа состоит в степени зашумленности данных, а так же характере самого изображения. Самые распространенные - аппроксимация каждой строки своим полиномом и, соответственно, вычитая его. Зачастую достаточно выровнять строки вычетом среднего. Но в нашем случае строки наклонены друг относительно друга. Поэтому в работе использован способ вычитания полинома 1 степени. Это позволило выровнять строки по наклону и уровню. Опасность этого метода состоит в том, что если рост среднего значения обусловлен, к примеру, наличием ступеньки, этот метод может ее повредить. В нашем случае особенности перпендикулярны направлению сканирования, поэтому мы не испытываем этого влияния.

Фурье-фильтрация

Полученный сигнал часто оказывается зашумлен. Это может быть как белый шум, так и имеющий выделенную гармонику. Получив фурье-образ этих данных, мы можем отсечь лишнюю часть гармоник. Для получения более сглаженного изображения стоит удалять весь высокочастотный сигнал. Однако вместе с этим могут быть искажены данные. В рамках данного исследования предполагалось усреднение значений по большим областям и нужды в сильной фильтрации не возникло. Были вычтены лишь шумы на выделенных гармониках.

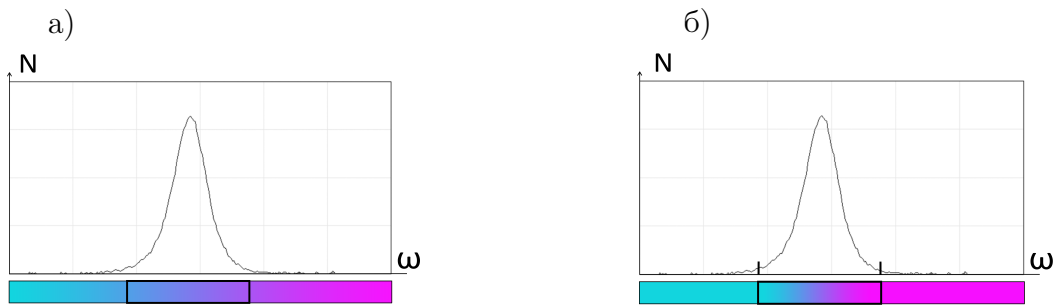


Рис. 2.9. Иллюстрация работы метода визуального представления данных, в котором в цветовой шкале находятся лишь 95% значений. Рамкой на шкале отмечен диапазон, в котором находятся 95% точек.

а) Случай, когда цветовая шкала покрывает весь диапазон значений. б) Случай, когда цветовая шкала покрывает 95% значений.

Визуализация

Для удобства читателя данные стоит представить в удобном и понятном виде. Для этого существует множество методов. Один из них - сдвинуть границы цветовой шкалы так, чтобы все изменение цвета приходилось 95% значений. Смысл этого метода проиллюстрирован на рисунке 2.9. Когда за счет шума на изображении появляются выбросы, сильно растягивается цветовой диапазон, из-за чего становятся плохо различимы изучаемые особенности. Рамкой на шкале цвета отмечен диапазон, в котором находятся основные особенности. Наглядно видно, что такой метод обеспечивает большую различимость деталей.

Глава 3

Обсуждение и результаты

3.1. Подготовка образца

В работе было проведено исследование образца $\text{Ge}_{0.4}\text{Mn}_{0.6}\text{Bi}_2\text{Te}_4$. Его приклеили серебряным клеем к измерительной подложке. Перед измерением была проведена многократная механическая эксфолиация поверхности скотчем. Образец - слоистый Ван-дер-Ваальсовый кристалл. Поэтому этот метод позволяет снять окислившиеся и поврежденные слои. Для безопасного исследования поверхности методом МСМ/АСМ необходимо, чтобы она была достаточно ровной и была параллельна измерительной подложке. Поэтому при эксфолиации стремились получить подходящую гладкую площадку. На рисунке 3.1 показан процесс механической эксфолиации. Видно, что удалось отщипнуть цельный слой. Это позволяет быть уверенным в качестве поверхности. На рисунке 3.2.б показано место, которое было выбрано для измерений. Так как максимальная область сканирования нашей установки на низких температурах составляет всего 22мкм на 22мкм, могут подойти любые ровные места на поверхности образца.

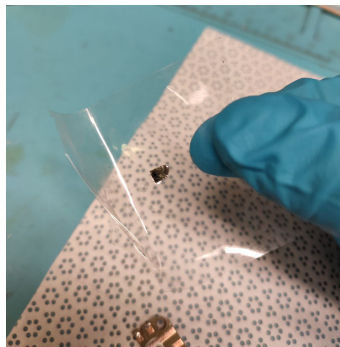


Рис. 3.1. Фотография сделанная в процессе механической эксфолиации кристалла при помощи скотча.

Далее подложка с образцом помещается в измерительную вставку (Рис. 3.3). Перед помещением вставки в криостат зонд был подведен к поверхности в указанном месте. Это показано на рисунке 3.3. Далее была проведена настройка микроскопа. После проверки работоспособности установки зонд был отведен от поверхности на расстояние, достаточное, чтобы обеспечить его сохранность в процессе охлаждения. Это важно, так как при охлаждении за счет тепловых эффектов, к примеру теплового расширения, игла

может быть повреждена.



Рис. 3.2. Изображения измеряемого образца ($\text{Ge}_{0.4}\text{Mn}_{0.6}\text{Bi}_2\text{Te}_4$), полученные через оптический микроскоп. а) Видно измерительную подложку с закрепленным образцом. б) Видно изображение образца. Врезка - приближено гладкое место, в котором производилось измерение методом МСМ.

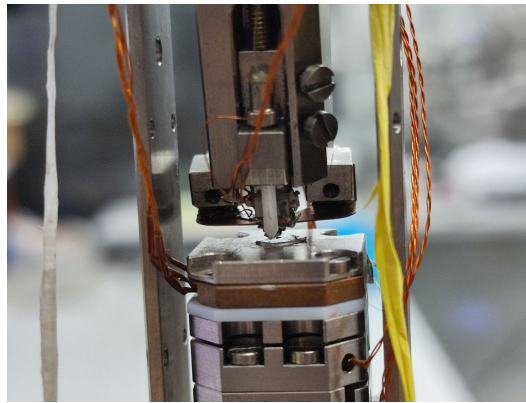


Рис. 3.3. На фотографии изображен образец на измерительной подложке, установленный в МСМ. Зонд наводится на область, в которой после охлаждения в криостате будет производиться исследование.

3.2. Измерения АСМ и МСМ нулевом поле

Измерения МСМ $\text{Ge}_{0.4}\text{Mn}_{0.6}\text{Bi}_2\text{Te}_4$ проводились при 5К. Поддержание этой температуры контролировалось по датчику, расположенному под измерительной подложкой (Медная пластина под измерительной подложкой на рисунке 3.3). Давление обменного газа было меньшим, чем используется обычно при таких измерениях. Пониженное давление дало повысить добротность колебаний кантилевера. Так была увеличена чувствительность в ходе дальнейших измерений. Так же счет низкого давления удерживалась повышенная температура. В обычных условиях криостат бы работал при 4К.

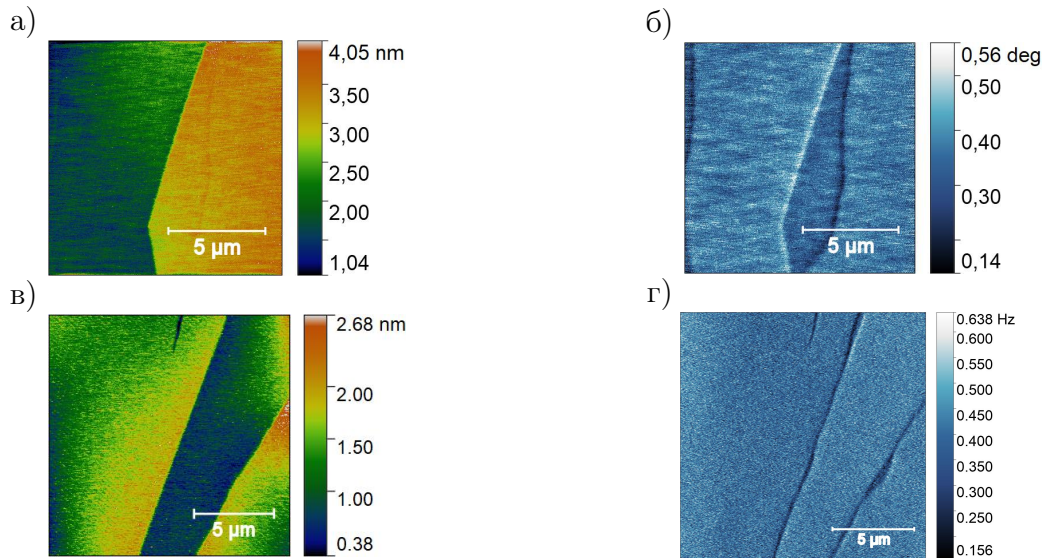


Рис. 3.4. а) Данные топографии поверхности при измерениях МСМ при повышении внешнего магнитного поля. б) Данные магнитного сигнала при повышении магнитного поля ($B = 0$ Гс). Виден магнитный контраст на однослойной ступеньке и на доменной стенке. в) Данные топографии поверхности при измерениях МСМ в случае направлении поля в противоположную сторону. г) Данные магнитного сигнала при обратном направлении поля ($B = 6000$ Гс). Виден сигнал соответствующий двум однослойным ступенькам.

Перед измерением было необходимо обнаружить место, в котором мы могли бы наблюдать однослойную ступеньку и, желательно, доменную стенку. Так как в работе нас интересует изучение поведения обоих окончаний. То есть, направлений намагниченности верхнего слоя антиферромагнетика. Для этого проводилось сканирование образца в полуконтактном АСМ режиме. Образец оказался атомно гладким и поиск занял длительное время. Из-за ровной поверхности образца мы можем использовать однопроходную методику модуляции резонансной частоты для дальнейших измерений МСМ. Это бесконтактная методика, в которой обратная связь поддерживает сдвиг фазы равным нулю, а регистрируется сдвиг резонансной частоты.

На рисунках 3.4.а и 3.4.б показано обнаруженное место - его топография и магнитный сигнал соответственно. Эти сканы были получены в двухпроходной методике МСМ. Мы видим ступеньку высотой ~ 1.3 нм, что соответствует высоте одного семи-атомного слоя $\text{Ge}_{0.4}\text{Mn}_{0.6}\text{Vb}_2\text{Te}_4$. На карте магнитного сигнала (Рис. 3.4.б) мы видим магнитный контраст, как на однослойной ступеньке, так и на доменной стенке. Причем область, которая находится между ними темнее, чем остальной рисунок. Это говорит о том, что МСМ чувствует разные окончания. На рисунке 3.4.б рядом с вкладом от ступеньки мы видим контраст, который соответствует доменной стенке. Слабый вклад

от нее также виден на карте топографии (Рис. 3.4.а). Он внес искажение порядка 0,1 нм.

Был изучен профиль топографии и магнитного сигнала обнаруженного места. На рисунке 3.5.а отмечено место в котором исследовался профиль. Профиль проведен через доменную стенку и однослойную ступеньку. Мы можем видеть несовпадение сканов топографии и магнитного сигнала. Это произошло в связи с тем, что игла задела образец перед началом исследования прямого направления поля. Для совмещения профилей был использован скан сделанный в двухпроходной методике. Полученные данные изображены на рисунке 3.5.б. График магнитного сигнала имеет две особенности. Первая (при $x \approx 1,5 \mu\text{м}$) соответствует доменной стенке, а вторая (при $x \approx 4,2 \mu\text{м}$) однослойной ступеньке. На основании этих данных схематично нанесены стрелки, показывающие магнитный порядок поверхности образца. Мы видим, что на разных окончаниях отличается уровень сдвига резонансной частоты dF . Это говорит о том, что верхний слой влияет на поверхностную намагниченность, которая чувствуется в МСМ.

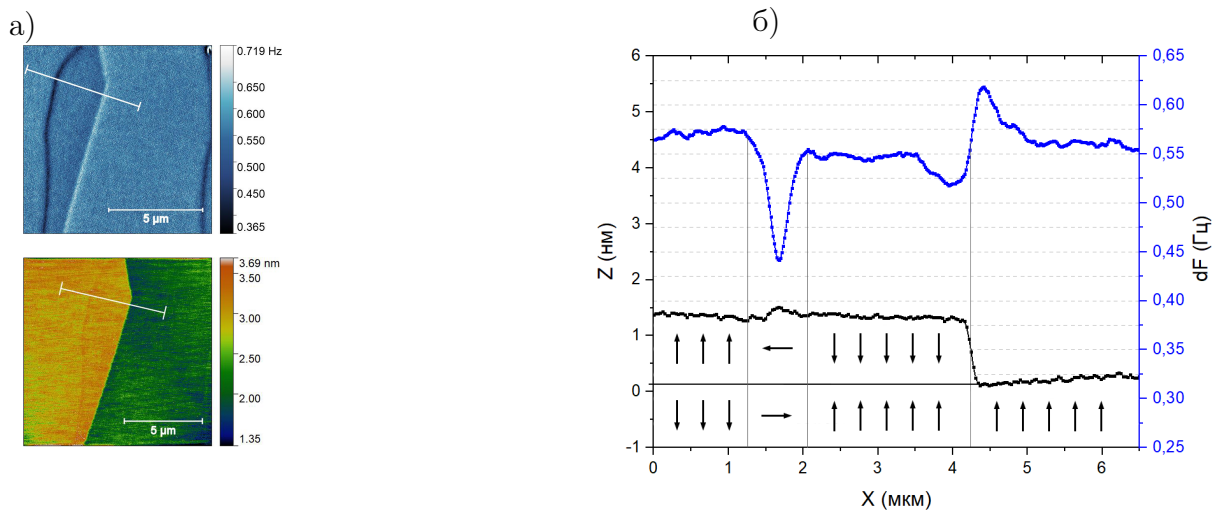


Рис. 3.5. а) На картах топографии и магнитного сигнала отмечен исследуемый профиль. Верхняя панель - магнитный сигнал при $B = 6500 \text{ Гс}$, нижняя - рельеф поверхности. б) Профили топографии и магнитного сигнала в указанном месте. Синяя зависимость - магнитный сигнал, черная - топография. Стрелками схематично указан соответствующий магнитный порядок внутри образца.

3.3. Измерения МСМ в магнитном поле

Было проведено исследование в широком диапазоне полей от 0 до 2.025 Тл с высокой дискретизацией. В ходе измерений получено 35 карт магнитного сигнала. Шаг

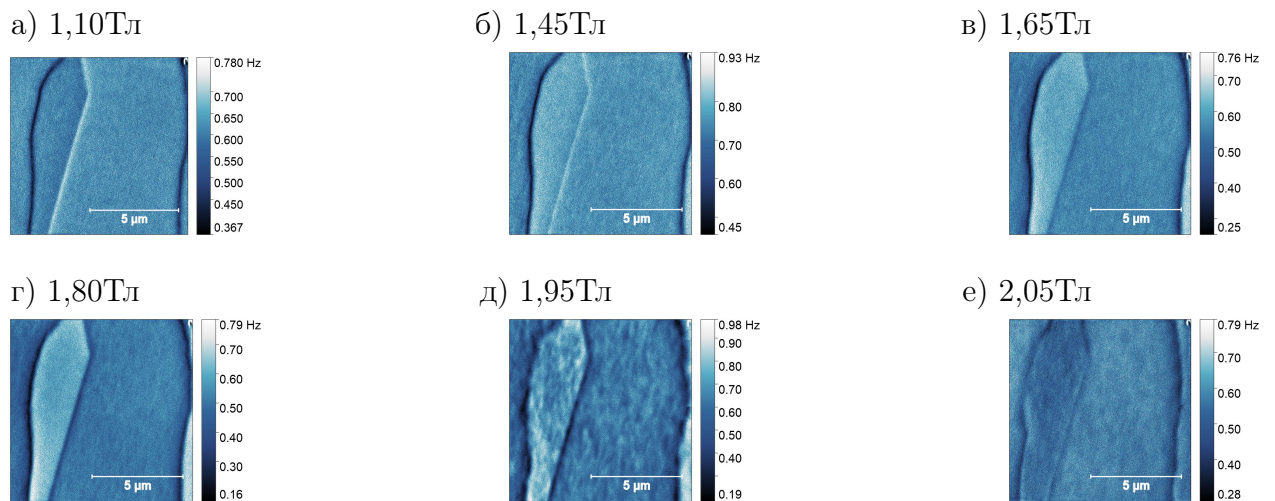


Рис. 3.6. Данные магнитного сигнала при разных характерных полях.

варьировался в зависимости от ожидаемых полей фазовых переходов. Такой маленький шаг по полю нужен, чтобы иметь возможность точно определить поля переходов.

Далее в связи со смещением области сканирования было проведено аналогичное измерение для противоположного направления магнитного поля в диапазоне от 0 до -6,1Тл. В нем было получено 45 карт магнитного сигнала. Область, выбранная для второго сканирования указана на рисунке 3.4.в. На рисунке 3.4.г указан соответствующий магнитный сигнал. Для иллюстрации магнитного сигнала в "обратном" проходе по полю была выбрана карта при $B = 6000$ Гс.

На рисунках 3.6 выделены карты магнитного сигнала при проходе по полю в прямом направлении. Они характеризуют различные обнаруженные конфигурации. Цвет здесь означает величину сдвига резонансной частоты. Более темные места означают, что в них меньший сдвиг относительно среднего. На рисунке 3.6.а мы можем говорить примерном равенстве магнитного сигнала на обоих окончаниях, это сигнализирует о нахождении образца в антиферромагнитном упорядочении. Далее на рисунках 3.6.б, 3.6.в и 3.6.г видно сильное потемнение одного из доменов. Это говорит о том, что произошел поверхностный спин-флоп эффект для тех доменов, что намагничены против приложенного поля - SSF_a . Далее на рисунке 3.6.е мы видим переход в другую менее контрастную фазу, в которой, предположительно, произошел поверхностный спин-флоп для доменов, верхний слой которых направлен по приложенному полю - SSF_p . В процессе измерений была обнаружена сильная флуктуационная фаза (Рис. 3.6.д).

Для более точного определения полей переходов была построена разница магнитного сигнала на двух доменах - доменный контраст. На нем были помещены данные для положительного и отрицательного направления полей (Рис. 3.7). Так как кристалл яв-

ляется антиферромагнетиком А-типа, мы ожидаем два вида окончаний отличающиеся направлением верхнего слоя (вверх, либо вниз). В обоих случаях мы имеем одноатомную ступеньку на которой меняется направление верхнего слоя, что позволяет найти разность намагниченностей.

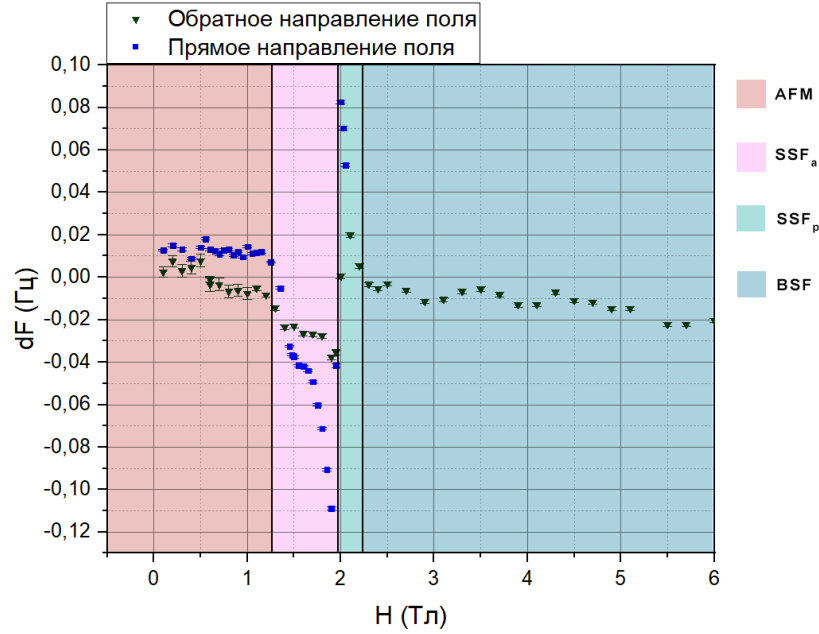


Рис. 3.7. Зависимость разности магнитных сигналов на соседних доменах. Магнитное поле взято по модулю.

На полученном графике (Рис. 3.7) цветом отмечены выделенные состояния антиферромагнетика. Мы можем видеть малую разницу намагниченностей до $\sim 1,3$ Тл. Это сигнализирует об антиферромагнитный упорядочении. На рисунке 3.7 это отмечено, как AFM. При дальнейшем повышении поля мы видим скачек разности магнитных сигналов. Это указывает на SSF_a поверхностный спин-флоп переход. Далее в поле 1,95 Тл происходит поверхностный спин-флоп SSF_p . А выше поля $\sim 2,3$ Тл мы видим выход зависимости магнитного контраста от поля на прямую. Данный линейный вклад происходит из-за наличия наклона образца. Мы начинаем видеть влияние разного расстояния до поверхности. Соответственно, предполагаем, что при $\sim 2,3$ Тл происходит выравнивание магнитного сигнала, что говорит об объемном спин-флоп переходе. Отношение полей H_{SSF_a}/H_{BSF} получается равным $\sim 0,6$, что меньше, чем в теоретической модели Миллса (0,7), но близко к литературным данным для $MnBi_2Te_4$. Переход при поле $H_{SSF_p} = 1,95$ Тл не предсказывался теоретически.

Было проведено исследование контраста между разными участками одного домена (Рис. 3.8). Цветом отмечены поля переходов, полученные с графика доменного

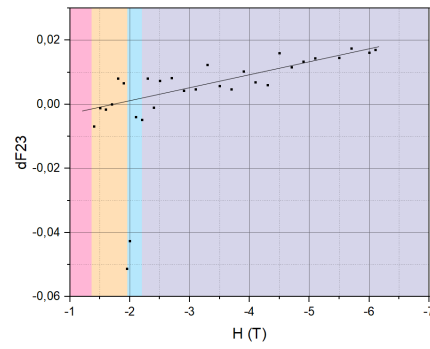


Рис. 3.8. Зависимость разности магнитных сигналов в разных местах одного домена. Цветом отмечены характерные поля переходов. Видно отклонение от линейной зависимости происходит в поле $H = 1,95$ Тл, в котором реализуется сильная флуктуационная фаза.

контраста. Получена линейная зависимость магнитного сигнала. Отклонение от нее произошло в поле, в котором была обнаружена сильная флуктуационная фаза. Таким образом, мы считаем, что доменный контраст, получен с точностью до линейного вклада.

При каждом новом сканировании зонд отводился от образца для измерения частоты возбуждения колебаний. Она подстраивалась под резонансную частоту колебаний кантеливера, так как она сдвигается при изменении поля. Измерения магнитного сигнала происходили методом модуляции резонансной частоты. Ожидалось, что имея данные о резонансной частоте колебаний кантеливера и карты сдвига резонансной частоты мы сможем извлечь из этих данных зависимости намагниченности от поля для каждого домена. Тем самым получить легко интерпретируемые данные.

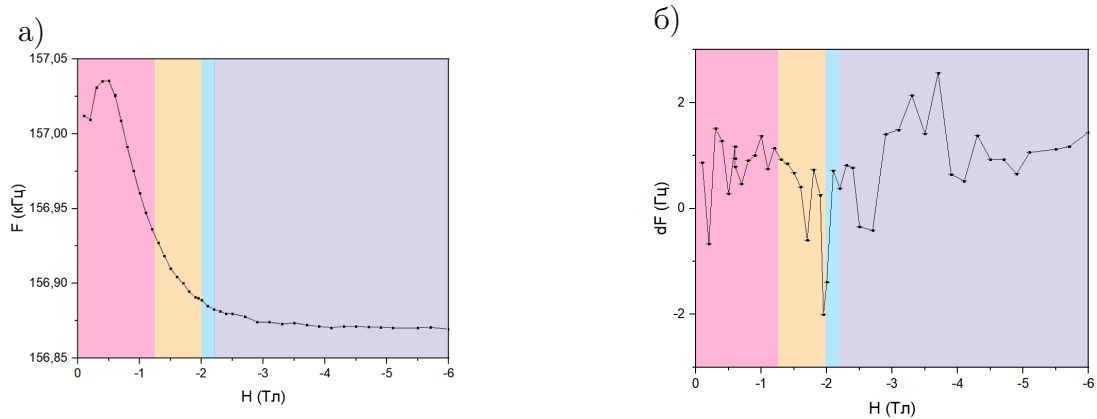


Рис. 3.9. а) Частота резонанса колебаний кантеливера в процессе измерения. б) Средний сдвиг резонансной частоты колебаний при приближении зонда к образцу. Цветом обозначено соответствие поля типу упорядочения, обнаруженному в образце.

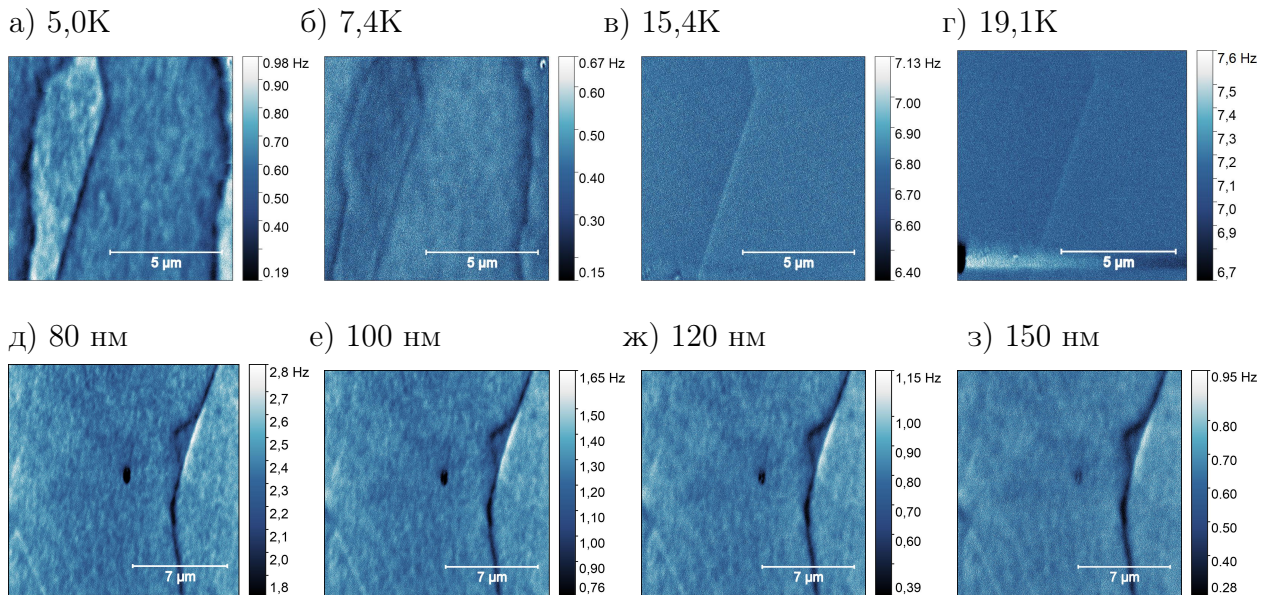


Рис. 3.10. Сильная флуктуационная фаза при 1,95 Тл. а-г - зависимость от температуры. д-з - зависимость от расстояния между поверхностью и зондом.

Были построены графики зависимости частоты резонанса колебаний кантеливера перед подводом к образцу и средний сдвиг резонансной частоты на одном из доменов (Рис. 3.9). Цветом отмечены соответствующие поля переходов. На рисунке 3.9.а мы видим зависимость частоты резонанса кантеливера в отведенном состоянии. На рисунке 3.9.б изображен средний сдвиг частоты резонанса для одного из доменов. Мы видим отсутствие корреляции этих зависимостей с нанесенными полями переходов. Так же видно, что сдвиг частоты в пределах одного домена происходит на порядках 10^0 Гц, в то время как разность значений между доменами 10^{-2} Гц, что так же говорит о том, что нет корреляции с поверхностной намагниченностью.

Для исследования свойств флуктуационной фазы были проведены дополнительные измерения по температуре в диапазоне 5,0-19,1 К, а так же в зависимости от расстояния между иглой и образцом в диапазоне 80-150 нм.

Полученные данные изображены на рисунке 3.10. Температура Нееля для кристалла $\text{Ge}_{0,4}\text{Mn}_{0,6}\text{Bi}_2\text{Te}_4$ составляет 15 К. На рисунках 3.10.а -3.10.г мы видим уменьшение магнитного контраста и полное его исчезновение выше 15 К. Изучение фурье-образа флуктуационной области показало ее пространственную ашерпериодичность. На рисунках 3.10.д - 3.10.з показаны характерные карты магнитного контраста в зависимости от расстояния между зондом и поверхностью образца. Мы видим, что это не приводит к пропаданию магнитного сигнала, лишь к его ослаблению. Из этих данных видно, что выше температуры Нееля пропадает контраст связанный с доменной стенкой, однако

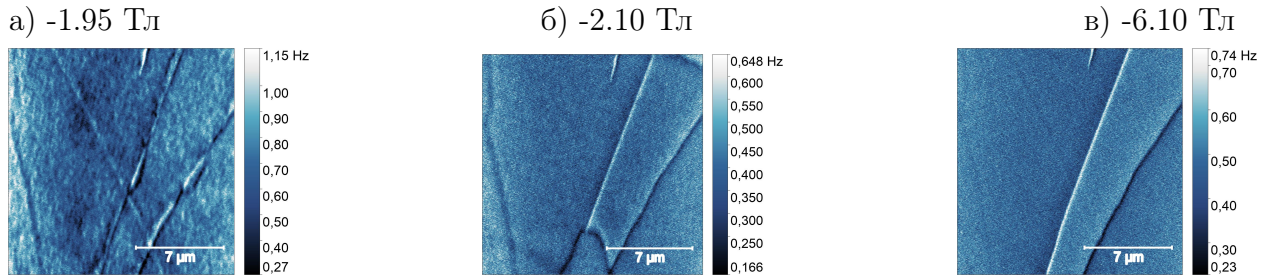


Рис. 3.11. Домены в спин-флоп фазе $\text{Ge}_{0.4}\text{Mn}_{0.6}\text{Bi}_2\text{Te}_4$ при разных полях.

остается слабое влияние однослойной ступеньки, связанное с изменением ее высоты.

Выше поля перехода $SSF_p = 1.95$ Тл мы видим образование доменов в спин-флоп фазе. Предположительно, их отличие друг от друга состоит в том, что неелевчкий вектор антиферромагнетизма направлен вдоль различных кристаллографических осей. Мы можем зарегистрировать это так, как образец находится под небольшим наклоном. За счет этого домены вносят различный вклад в Z -компоненту намагниченности и могут быть зарегистрированы нашим МСМ.

3.4. Магнитное моделирование

3.4.1. Моделирование объемных магнитных свойств

Магнитное моделирование объемных свойств образца проводилось в программе Igor Pro. Был использован готовый программный код, который рассматривал следующий гамильтониан:

$$H = \sum_i^N (H_{CEF,i} - \mu_i \cdot \mathbf{V}_{ext} - \frac{3k_b}{J(J+1)} \sum_{i,j}^N T_{ij} \mathbf{J}_i \cdot \langle \mathbf{J}_i \rangle - \frac{K}{J^2} \sum_i^N \mathbf{J}_{z,i} \cdot \langle \mathbf{J}_{z,i} \rangle) \quad (3.1)$$

Здесь N - количество магнитных подрешеток, H_{CEF} - кристаллическое поле, T_{ij} - значения обменных констант, K - коэффициент одноосной магнитокристаллической анизотропии.

В нашем случае моделируется антиферромагнитный кристалл, у которого две магнитные подрешетки, отличающиеся лишь противоположным направлением магнитного момента. Влияние кристаллического поля не учитывалось.

Выдвигалось предположение, что магнитные свойства $\text{Ge}_{0.4}\text{Mn}_{0.6}\text{Bi}_2\text{Te}_4$ можно получить линейным уменьшением обменных констант. Так как мольная доля Ge в измеренном образце составляет 0,36, необходимо домножить их значения на 0,64. Поэтому параметры подбирались по известным $H_c = 8,1$ Тл, $H_{ab} = 10,9$ Тл, $H_{BSF} = 3.7$ Тл,

$T_N = 25$ К - полю насыщения вдоль оси c , плоскости ab , полю объемного спин-флоп перехода и температуре Нееля для MnBi_2Te_4 .

Сначала было произведено моделирование в модели изотропного обмена и одноосной анизотропии. Эта модель предполагает три изменяемых переменных - константы обменного взаимодействия между слоями, внутри слоя и константу магнитной анизотропии. Для этой простой модели подобраны следующие значения параметров моделирования: обменные константы равные $T_{11} = 16,4$ К и $T_{12} = -7,1$ К и константа анизотропии равная $K = 0.28$. Так как подобрать значения трех констант так, чтобы попасть сразу в четыре значения невозможно, удалось совместить все физические величины, кроме поля $H_{ab} = 10,0$ Тл, которое не несло для нас принципиальной необходимости.

При попытке пропорционально уменьшить обменные константы совпала лишь температура Нееля для $\text{Ge}_{0.4}\text{Mn}_{0.6}\text{Bi}_2\text{Te}_4$. Остальные величины отличались от известных результатам измерений и литературным данным. Однако удалось получить хорошее совпадение, если вместе с обменными константами уменьшить и константу анизотропии, домножив ее на 0,6. Это не несет физического смысла, поэтому был сделан вывод о необходимости использовать более сильную модель.

В качестве более сложной модели был использован изотропный обмен без использования анизотропии. Его отличие состоит в том, что теперь рассматриваются отдельно константы компонент обменного взаимодействия вдоль легкой оси c и компоненты вдоль ab . Таким образом, для его описания необходимо 4 значения.

Были получены новые обменные константы. Подбор происходил методом градиентного спуска. Для этого считались приближенные значения производных. Так как в этой модели необходимо подбирать 4 параметра, была возможность попасть сразу во все четыре физические величины. Этому удалось достичь с высокой точностью. Дальше обменные константы были пропорционально уменьшены, что дало близкие к ранее измеренным для $\text{Ge}_{0.4}\text{Mn}_{0.6}\text{Bi}_2\text{Te}_4$ значениям.

Полученные данные изображены на рисунках 3.12. На первом графике показана зависимость намагниченности антиферромагнетика от температуры. Из него мы получаем температуру Нееля $T_N = 16$ К. На следующем графике изображена намагниченность в зависимости от магнитного поля, направленного вдоль кристаллографической оси c . Мы видим объемный спин-флоп при $H_{BSF} = 2,36$ Тл, что соотносится с полученными данными. При поле $H_c = 5,09$ Тл происходит насыщение - магнитные моменты выстраиваются вдоль приложенного поля. Цветом помечены соответствующие состояния антиферромагнетика. На последнем графике также намагниченность в зависимо-

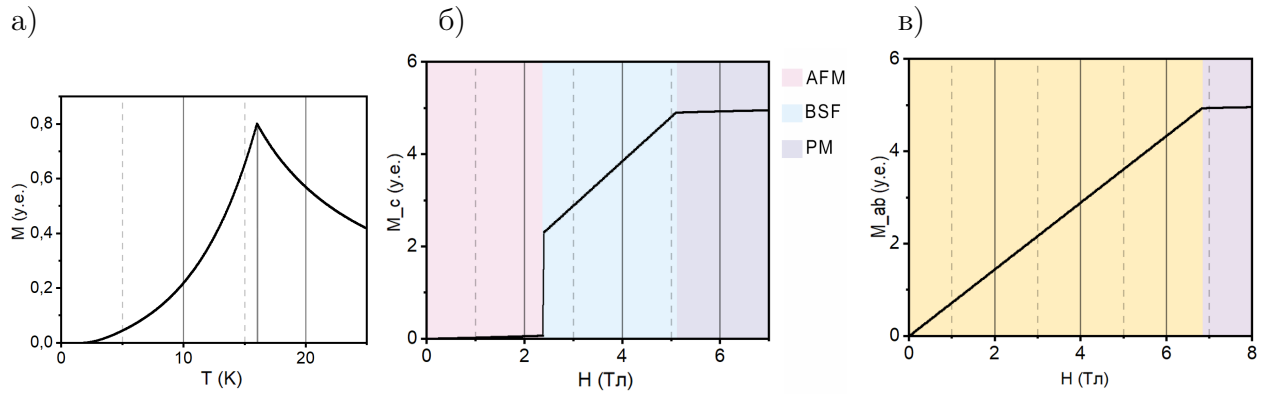


Рис. 3.12. Результаты моделирования объемных магнитных свойств. $\text{Ge}_{0.36}\text{Mn}_{0.64}\text{Bi}_2\text{Te}_4$

а) Зависимость намагниченности кристалла от температуры. б и в - Намагниченность кристалла в зависимости от магнитного поля, приложенного вдоль б) кристаллографического вектора c , в) кристаллографических векторов a и b .

сти от магнитного поля, но в случае поля направленного перпендикулярно легкой оси намагничивания. При $H_{ab} = 6,83$ Тл произошло насыщение.

При определении поля спин-флоп перехода из графика была следующая особенность. Значения энергий вблизи перехода между АФМ и спин-флоп фазами были достаточно близки, что приводило к гистерезису и трудностям в определении поля спин-флопа. Для решения этого вопроса были предприняты следующие меры. При моделировании полевых зависимостей для каждого нового значения поля система предварительно инициализировалась в начальное состояние. А в начальном состоянии магнитные моменты были повернуты на некоторый угол, что уменьшило гистерезис. Далее в результате квантового моделирования они переходили в оптимальные значения. Вопрос подбора оптимального угла для начальных условий существенно важен при моделировании поверхностных свойств. Так как существенно больший объем данных не позволяет производить уточнение значения в ручную.

3.4.2. Моделирование поверхностных свойств

Далее проводилось моделирование магнитных свойств поверхности $\text{Ge}_{0.4}\text{Mn}_{0.6}\text{Bi}_2\text{Te}_4$. Для моделирования поверхности будем аналогично рассматривать анизотропное обменное взаимодействие. Параметры моделирования возьмем из предыдущего исследования. Фактически, вместо поверхности в моделировании мы можем задать слэб, состоящий из конечного числа слоев.

В поверхностном моделировании важную роль играют граничные условия. В рамках исследуемой задачи предполагалось, что у первого слоя нет верхнего соседа, а

у последнего сосед обладает объемными свойствами.

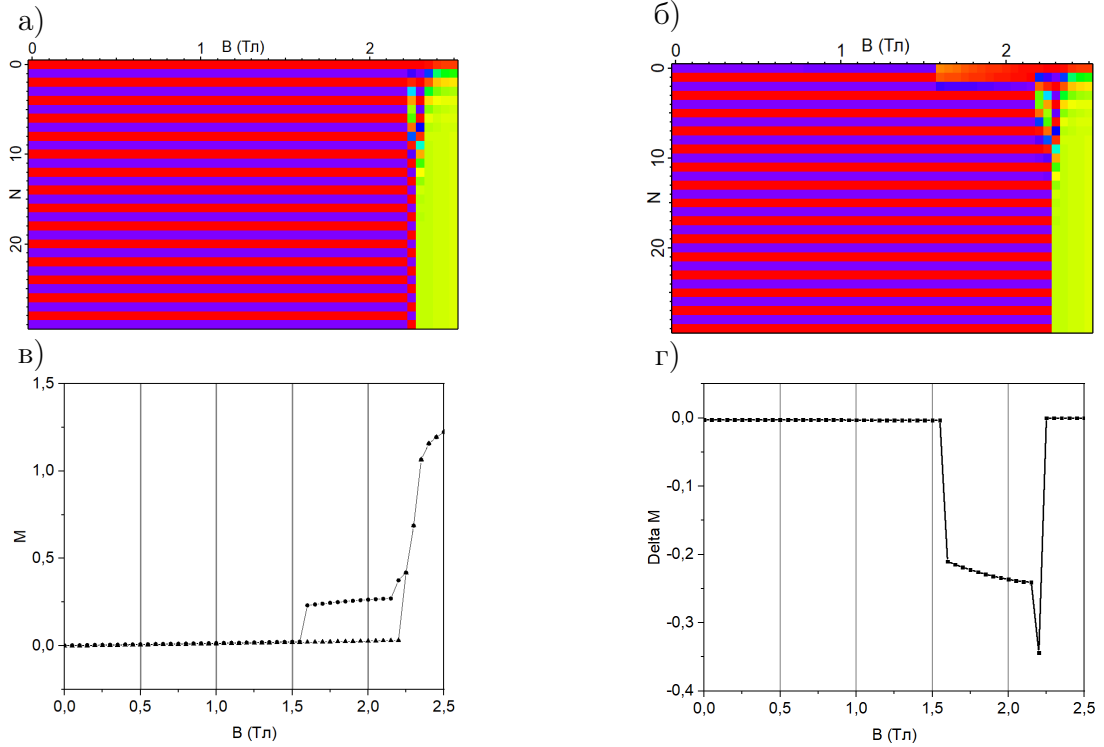


Рис. 3.13. Результат моделирования поверхностных свойств $\text{Ge}_{0.4}\text{Mn}_{0.6}\text{Bi}_2\text{Te}_4$ для 30 слоев и $H_{BSF} = 2,36$ Тл. Цветом отмечена величина Z -компоненты магнитного момента. Красным отмечены магнитные моменты, направленные вверх, синим направленные вниз, соответственно, зеленым малое положительное значение. а) и б) - два разных окончания. в) Зависимость намагниченности обоих доменов от поля. г) Разность намагниченностей между доменами.

При моделировании было рассмотрено разное количество слоев N . Для создания картинок выбраны те, в которых виден нужный эффект и можно видеть затухание поверхностного вклада к объему. На рисунках 3.13 мы видим результат моделирования для двух разных доменов при $N = 30$. Использован цветовой диапазон от красного до синего для индикации Z -компоненты магнитного момента. Красному соответствует направление магнитного момента вверх, синему, соответственно вниз. Зеленый означает небольшое положительное значение. Нумерация слоев начинается от поверхности. Моделирование проводилось в модели ближайших соседей. На рисунке 3.13.а мы видим объемный спин-флоп переход при 2,3 Тл. На второй картинке 3.13.б мы видим поверхностный спин-флоп переход при 1,6 Тл, что больше, чем $H_{SSF_a} = 1,4$ Тл, полученное в наших измерениях. Далее мы аналогично видим объемный спин-флоп. Переход SSF_p в этом моделировании не наблюдался. На рисунке 3.13.в находятся намагниченности обоих доменов. При их расчете учитывался вклад первых 20 слоев. Здесь мы также видим поверхностный спин-флоп переход 1,6 Тл, а затем объемный при ~ 2.3 Тл. Да-

лее был посчитан доменный контраст. Он выведет на рисунке 3.13.г. На нем мы видим картину, похожую на полученную в эксперименте. За тем исключением, что в этой модели отсутствует SSF_p переход. Так же мы видим, что возмущение, которое создается поверхностью, полностью затухает на 15 верхних слоях.

Была осуществлена попытка подобрать значения таким образом, чтобы воспроизвести величину поверхностного спин-флоп перехода. Были подобраны новые обменные константы, которые воспроизвели H_{SSF_a} . На рисунке 3.14.а представлен график намагниченностей доменов во внешнем поле. Мы видим поле поверхностного спин-флоп перехода при 1,38 Тл, что хорошо совпадает с измеренными данными. Объемный спин-флоп переход сместился на 2,0 Тл. На второй картинке 3.14.б аналогично видим поле спин-флоп перехода.

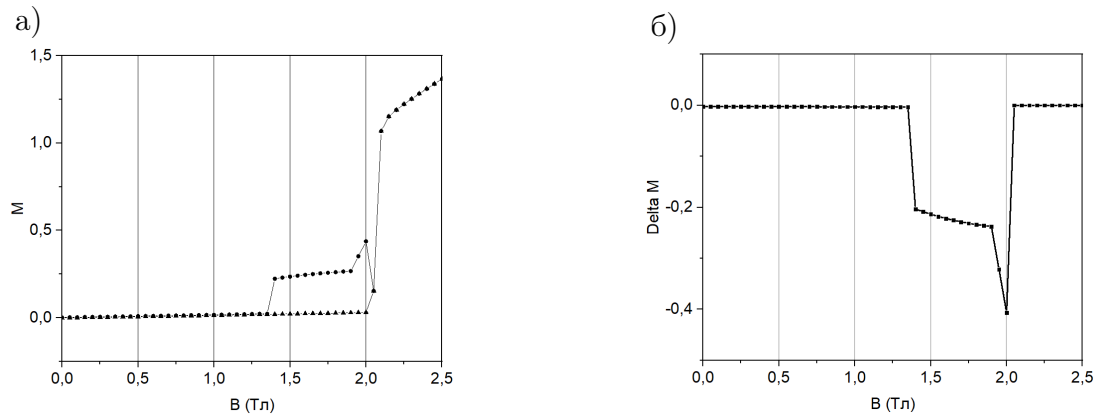


Рис. 3.14. Результат моделирования поверхностных свойств $\text{Ge}_{0.4}\text{Mn}_{0.6}\text{Bi}_2\text{Te}_4$ для 25 слоев. а) Зависимость намагниченности обоих доменов от поля. б) Разность намагниченностей между доменами.

Полученные результаты описывают качественное поведение материала, но не описывают часть эффектов. Использование более сильной модели требует большего количества параметров. Что не физично делать без дополнительных данных, основанных, к примеру, на первопринципных расчетах. Возможно, для более точного описания необходимо использовать другие граничные условия. В этой работе предполагалось, что у первого слоя нет верхнего соседа, что уменьшает обмен между слоями в два раза. Мы можем варьировать эту величину, а также менять обменные константы для других слоев. Однако для этого необходимы дополнительные данные.

Заключение

В ходе работы проведены эксперименты на криогенном магнитно-силовом микроскопе и получены карты магнитного сигнала в широком диапазоне полей. Показано, что основное состояние кристалла $\text{Ge}_{0.4}\text{Mn}_{0.6}\text{Bi}_2\text{Te}_4$ отвечает антиферромагнетику А-типа с неелевским вектором, параллельным кристаллографической оси c .

Обнаружено, что при приложении внешнего магнитного поля происходит поверхностный спин-флоп переход в изучаемом антиферромагнитном топологическом изоляторе $\text{Ge}_{0.4}\text{Mn}_{0.6}\text{Bi}_2\text{Te}_4$. Также вблизи поверхностного спин флоп перехода SSF_p было исследовано пространственное распределение намагниченности. Показано, что магнитная структура поверхности кристалла вблизи поверхностного спин флоп перехода SSF_p характеризуется сильными и стабильными во времени неоднородностями намагниченности в пределах одного домена. Выше поля спин-флоп перехода H_{SSF_p} обнаружены домены в спин-флоп фазе, предположительно отвечающие доменам с различной внутриплоскостной компонентой неелевского вектора.

В рамках квантовой модели Гейзенберга было проведено моделирование магнитной структуры в различных полях и при различных температурах. Показано, что объемный спин флоп переход связан с наличием магнитокристаллической анизотропии или анизотропного обменного взаимодействия в кристалле. При этом в рамках данной модели при рассмотрении конечного количества слоев был воспроизведен SSF_a переход на поверхности кристалла $\text{Ge}_{0.4}\text{Mn}_{0.6}\text{Bi}_2\text{Te}_4$.

Благодарность

Благодарю к.ф.-м.н Александра Сергеевича Фролова за мудрое научное руководство на протяжении почти года работы, пример преданности своему делу и за полученные знания и опыт.

Выражаю свою признательность коллективу Центра перспективных методов мезофизики и нанотехнологий МФТИ и лично его руководителю Василию Сергеевичу Столярову, д-ру физ.-мат. наук за возможность работать в центре, за руководство и опытное направление в научной деятельности и за пример погруженности в научную среду.

Благодарю д.ф.-м.н., проф. Дмитрия Юрьевича Усачева за помощь в освоении магнитного моделирования объемных и поверхностных свойств антиферромагнетика и за предоставление собственных вычислительных программ.

Список литературы

- [1] M. He et al. “Topological insulator: Spintronics and quantum computations”. In: *Front. Phys.* 14 (2019), p. 43401. DOI: 10.1007/s11467-019-0893-4.
- [2] Otrokov M.M. et al. “Prediction and observation of an antiferromagnetic topological insulator”. In: *Nature* 576 (2019), pp. 416–422. DOI: 10.1038/s41586-019-1840-9.
- [3] Cui-Zu Chang et al. “Colloquium: Quantum anomalous Hall effect”. In: *Rev. Mod. Phys.* 95: 1 (2023), p. 011002. DOI: 10.1103/RevModPhys.95.011002.
- [4] A.M. Shikin et al. “Nature of the Dirac gap modulation and surface magnetic interaction in axion antiferromagnetic topological insulator MnBi₂Te₄”. In: *Sci Rep* 10 (2020), p. 13226. DOI: 10.1038/s41598-020-70089-9.
- [5] A. M. Shikin et al. “Sample-dependent Dirac-point gap in MnBi₂Te₄ and its response to applied surface charge: A combined photoemission and ab initio study”. In: *Phys. Rev. B* 104: 11 (2021), p. 115168. DOI: 10.1103/PhysRevB.104.115168.
- [6] Paul M. Sass and Kim Jinwoong [et al.] “Robust *A*-Type Order and Spin-Flop Transition on the Surface of the Antiferromagnetic Topological Insulator MnBi₂Te₄”. In: *Phys. Rev. Lett.* 125 (2020), p. 037201. DOI: 10.1103/PhysRevLett.125.037201.
- [7] D.L. Mills. “Surface Spin-Flop State in a Simple Antiferromagnet”. In: *Phys. Rev. Lett.* 20 (1968), pp. 18–21. DOI: 10.1103/PhysRevLett.20.18.
- [8] Морозов А.И. и Сигов А.С. «Поверхностный спин-флоп в антиферромагнетике». В: *Успехи физических наук* 180, 7 (2010), с. 709–722. DOI: 10.3367/UFNr.0180.201007b.0709.
- [9] C. L. Kane and E. J. Mele. “Quantum Spin Hall Effect in Graphene”. In: *Phys. Rev. Lett.* 95: 22 (2005), p. 226801. DOI: 10.1103/PhysRevLett.95.226801.
- [10] Панкратов О. А. «Поверхностные состояния топологических изоляторов». В: *Успехи физических наук* 188 (2018), с. 1226–1237. DOI: 10.3367/UFNe.2017.12.038307.
- [11] W. P. Su et al. “Solitons in Polyacetylene”. In: *Phys. Rev. Lett.* 42: 25 (1979), pp. 1698–1701. DOI: 10.1103/PhysRevLett.42.1698.
- [12] M. Getzlaff. *Fundamentals of magnetism*. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2008, pp. 101–102.

- [13] D. Hsieh et al. “A topological Dirac insulator in a quantum spin Hall phase”. In: *Nature* 452 (2008), pp. 970–974. DOI: 10.1038/nature06843.
- [14] Zhang H. et al. “Topological insulators in Bi₂Se₃, Bi₂Te₃ and Sb₂Te₃ with a single Dirac cone on the surface”. In: *Nature Phys* 5 (2009), pp. 438–442. DOI: 10.1038/nphys1270.
- [15] D. Hsieh et al. “A tunable topological insulator in the spin helical Dirac transport regime.” In: *Nature* 460 (2009), pp. 1101–1105. DOI: 10.1038/nature08234.
- [16] D. Hsieh et al. “Observation of Time-Reversal-Protected Single-Dirac-Cone Topological-Insulator States in Bi₂Te₃ and Sb₂Te₃.” In: *Phys. Rev. Lett.* 103: 14 (2009), p. 146401. DOI: 10.1103/PhysRevLett.103.146401.
- [17] You Lai and Liqin Ke [et al.] “Defect-driven ferrimagnetism and hidden magnetization in MnBi₂Te₄”. In: *Phys. Rev. B* 103: 18 (2021), p. 184429. DOI: 10.1103/PhysRevB.103.184429.
- [18] A.S. Frolov et al. “Magnetic Dirac semimetal state of (Mn,Ge)Bi₂Te₄”. In: *Commun Phys* 7, 180 (2024). DOI: 10.1038/s42005-024-01675-w.
- [19] А. С. Фролов. «Структура и электронное строение бифункциональных материалов на основе смешанных теллуридов марганца, германия и висмута.» Дис. ... кан. физ.-мат. наук: 1.3.8. - Москва: Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), 2023, с. 128–129.
- [20] В. Л. Миронов. *Основы сканирующей зондовой микроскопии*. г. Нижний Новгород: Российская академия наук, Институт физики микроструктур, 2005. ISBN: 5-94836-034-2.
- [21] В. Л. Миронов. *Магнитно-резонансная силовая микроскопия ферромагнитных наноструктур*. г. Нижний Новгород: Российская академия наук, Институт физики микроструктур, 2016, с. 9.