

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ И ВЛИЯНИЯ
ВНЕШНЕГО ДАВЛЕНИЯ НА ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА
СОЕДИНЕНИЙ $A^{II}Mg_2Bi_2$ ($A^{II} = Mg, Ca, Sr, Ba$)

Е. К. Петров

Научный руководитель: доцент, к.ф.-м.н. В. М. Кузнецов

Национальный Исследовательский Томский Государственный Университет

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050

E-mail: eg901petrov@gmail.com

THEORETICAL INVESTIGATION OF ELECTRONIC BAND STRUCTURE AND EXTERNAL
PRESSURE EFFECT ON ELECTRONIC PROPERTIES OF $A^{II}Mg_2Bi_2$ ($A^{II} = Mg, Ca, Sr, Ba$)

E. K. Petrov

Scientific Supervisor: Associate Prof., Ph.D. V. M. Kuznetsov

Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin avn., 36, 634050

E-mail: eg901petrov@gmail.com

***Abstract.** The results of theoretical investigation of electronic band structure and topological properties of $A^{II}Mg_2Bi_2$ ($A^{II} = Mg, Ca, Sr, Ba$) using exact exchange are presented. It was found that Mg_2Bi_2 in its equilibrium state is a semimetal, and the other three compounds are direct band gap semiconductors. Also uniaxial strain of ternary compounds is predicted to lead to transitions to topologically non-trivial phases, such as topological insulator, topological and Dirac semimetal. Due to such wide range of topologically non-trivial phases these compounds may be interesting for further theoretical and experimental studies.*

Введение. В последнее время большое внимание уделяется изучению материалов с нетривиальными топологическими свойствами: топологических изоляторов [1–3] и дираковских полуметаллов [4–7]. В силу своих экзотических свойств, эти материалы являются многообещающими в плане их использования при создании электронных приборов нового поколения. Поэтому поиск и изучение таких материалов является актуальной задачей физики конденсированного состояния вещества.

Принципиальную роль в образовании топологически нетривиальных состояний в материале играет спин-орбитальное взаимодействие. Одним из наиболее простых способов управления топологическими свойствами представляется «усиление» спин-орбитального взаимодействия путем замещения атомов легких элементов более тяжелыми изоэлектронными аналогами, в результате чего материал может приобрести нетривиальные топологические свойства. Другой способ – различного рода деформация (гидростатическое сжатие, одноосная деформация и т.п.), в результате которой происходит изменение параметров кристаллической решетки. Комбинирование этих двух методов может позволить обнаружить соединения, в которых при определенных условиях возможно существование топологически нетривиальных фаз. Реализации этого подхода и посвящена данная работа.

Представлены результаты первопринципного теоретического исследования электронной структуры и топологических свойств соединений $A^{II}Mg_2Bi_2$ ($A^{II} = Mg, Ca, Sr, Ba$) в равновесном состоянии, под влиянием гидростатического давления и одноосной деформации.

Метод исследования. Расчеты проведены в рамках формализма теории функционала электронной плотности методом проекционных плоских волн, реализованном в программном коде VASP [8,9]. Для улучшения согласия расчетов с экспериментальными данными в расчет был включен точный обмен. Это было сделано за счет использования гибридного обменно-корреляционного функционала HSE06 [10, 11], хорошо зарекомендовавшего себя в расчетах электронных свойств полупроводниковых систем.

Результаты. В настоящей работе проведено первопринципное теоретическое исследование электронной структуры и топологических свойств группы соединений $A^{II}Mg_2Bi_2$ ($A^{II} = Mg, Ca, Sr, Ba$) в равновесном состоянии, а также под влиянием гидростатического давления и одноосной деформации с использованием точного обмена. Показано, что в равновесном состоянии соединение Mg_3Bi_2 является полуметаллом, а $CaMg_2Bi_2$, $SrMg_2Bi_2$ и $BaMg_2Bi_2$ представляют собой полупроводники с прямой фундаментальной запрещенной щелью 304, 255 и 249 мэВ соответственно, о чем свидетельствуют рассчитанные энергетические спектры (рис.1). В случае гидростатического давления в трехкомпонентных соединениях обнаружен переход полупроводник – полуметалл без изменения топологических свойств.

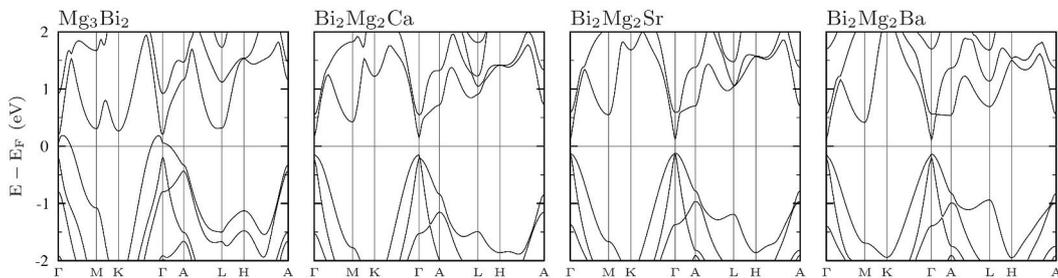


Рис. 1. Энергетические спектры рассматриваемых соединений в равновесном состоянии

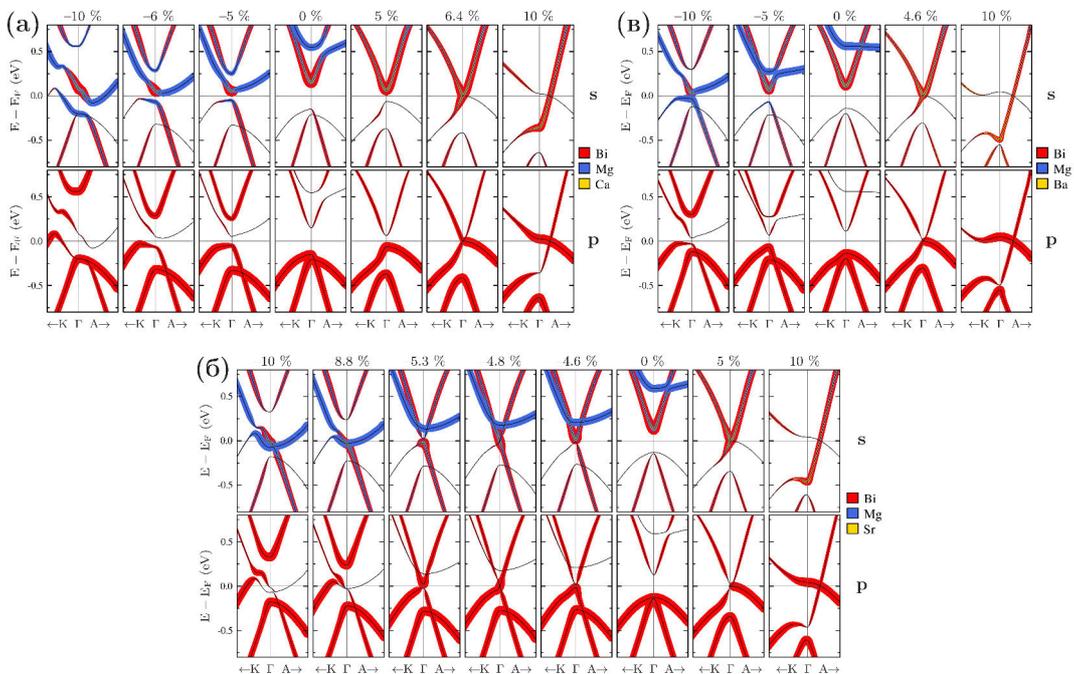


Рис. 2. Эволюция электронной структуры соединений $CaMg_2Bi_2$ (а), $SrMg_2Bi_2$ (б) и $BaMg_2Bi_2$ (в) при одноосном сжатии и растяжении. Цветом (см. легенду) показаны вклады s- (верхний ряд) и p-состояний (нижний ряд) компонентов соединений на фоне электронного энергетического спектра (черные линии). Толщина цветных линий пропорциональна вкладу соответствующих состояний

В случае одноосной деформации трехкомпонентных соединений ситуация кардинально меняется (рис 2). В результате одноосного растяжения соединения CaMg_2Bi_2 , SrMg_2Bi_2 и BaMg_2Bi_2 из полупроводниковой фазы переходят в фазу дираковского полуметалла. Одноосное сжатие приводит к более богатому спектру наблюдаемых электронных фаз. В соединении CaMg_2Bi_2 реализуется последовательность фазовых переходов полупроводник – топологический изолятор – топологический полуметалл, в соединении SrMg_2Bi_2 – полупроводник – дираковский полуметалл – топологический изолятор – топологический полуметалл, а в BaMg_2Bi_2 – полупроводник – топологический изолятор. Стоит отметить, что одноосная деформация Mg_3Bi_2 не приводит к изменениям топологических свойств.

Выводы. Обобщая вышесказанное, можно сделать вывод, что существует возможность управления топологическими свойствами соединений CaMg_2Bi_2 , SrMg_2Bi_2 и BaMg_2Bi_2 путем одноосного растяжения или сжатия. В случае соединения Mg_3Bi_2 ни один из рассмотренных видов деформации не приводит к качественным изменениям электронного спектра и топологических свойств. Благодаря богатому спектру топологически нетривиальных фаз соединения CaMg_2Bi_2 , SrMg_2Bi_2 и BaMg_2Bi_2 могут представлять интерес для дальнейших теоретических и экспериментальных исследований.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ereemeev S.V. Effect of the Atomic Composition of the Surface on the Electron Surface States in Topological Insulators $\text{A}_2\text{VB}_3\text{VI}$ / S.V. Ereemeev, Yu.M. Koroteev, E.V. Chulkov // JETP Lett. – 2010. – V. 91. – № 8. – P. 387–391.
2. Henk J. Complex Spin Texture in the Pure and Mn-Doped Topological Insulator Bi_2Te_3 / J. Henk, A. Ernst, S.V. Ereemeev, E.V. Chulkov et al. // Phys. Rev. Lett. – 2012. – V. 108. – № 20. – P. 206801–206806.
3. Hasan M. Z. Colloquium: Topological Insulators / M.Z. Hasan, C.L. Kane // Rev. Mod. Phys. – 2010. – V. 82. – № 4. – P. 3045–3067.
4. Liu Z. K. Discovery of a Three-Dimensional Topological Dirac Semimetal, Na_3Bi / Z.K. Liu, B. Zhou, Z.J. Wang et al. // Science. – 2014. – V.343. – № 6173. – P. 864–867.
5. Young S. M. Dirac Semimetal in Three Dimensions / S.M. Young, S. Zaheer, J.C.Y. Teo et al. // Phys. Rev. Lett. – 2012. – V. 108. – № 14. – P. 140405–140410.
6. Xu S.-Y. Observation of Fermi arc surface states in a topological metal / S.-Y. Xu, C. Liu, S.K. Kushwaha et al. // Science. – 2015. – V. 347. – № 6219. – P. 294–298.
7. Sklyadneva I.Yu. Pressure-induced topological phases of KNa_2Bi / I.Yu. Sklyadneva, I.P.Rusinov, R. Heid et al. // Scientific Reports. – 2016. – V. 6. – № 24137. – P. 1–6.
8. Kresse G. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set / G. Kresse, J. Furthmüller // Comput. Mater. Sci. – 1996. V. 6. – № 1. – P. 15–50.
9. Kresse G. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method / G. Kresse, D. Joubert // Phys. Rev. B. – 1998. – V. 59. – № 3. – P. 1758–1775.
10. Becke A.D. Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior // Phys. Rev. A. – 1988. – V. 38. – № 6. – P. 3098–3100.
11. Heyd J. Hybrid functionals based on a screened Coulomb potential / J. Heyd, G.E. Scuseria, M. Ernzerhof // J. Chem. Phys. – 2003. – V. 118. – № 18. – P. 8207–8215.