

Fazy topologiczne w związkach półprzewodnikowych II-VI: heterostruktury i układy domieszkowane magnetycznie

Rozważania dotyczące symetrii kryształów pozwalają na określenie liczby niezależnych parametrów (niezmienników), które należy wyznaczyć doświadczalnie lub metodami numerycznymi, aby w pełni opisać własności termodynamiczne i nierównowagowe poszczególnych materiałów krystalicznych. Niedawno wykazano, że ten – zdałoby się ugruntowany od lat pogląd – wymaga uzupełnienia: badania dowiodły, że wartość pewnych funkcjonatów (niezmienników topologicznych) rozpiętych na funkcjach Blocha poszczególnych półprzewodników i półmetali wyznaczają klasę topologiczną struktury pasmowej, przy czym międzywierzchnie materiałów należących do różnych klas topologicznych zawierają bezprzerwowe stany elektronowe wykazujące unikatowe właściwości, takie jak np. ochrona przed zjawiskami niszczącymi spójność kwantową stanów elektronowych, co jest istotne w urządzeniach informatyki kwantowej.

W ramach tego projektu, pod kierunkiem moich mentorów prof. Tomasza Dietla (promotor) i dr. Carmine Autieri (promotor pomocniczy) zastosuję współczesne relatywistyczne metody obliczeniowe struktury elektronowej z pierwszych zasad, w celu wyjaśnienia natury fizycznej zaskakujących zjawisk odkrytych w studniach kwantowych HgTe, które wraz z jednoatomowymi warstwami WTe₂, reprezentują unikatową klasę dwuwymiarowych izolatorów topologicznych. Ponadto będę szukał metodą symulacji komputerowych nowych właściwości struktur kwantowych z chalcogenidków rtęci, także domieszkowanych jonami magnetycznymi. Badania te, jak wierzę, będą stymulowały prace technologiczne i doświadczalne w mojej macierzystej instytucji, tj. Międzynarodowym Centrum Sprzężenia Magnetyzmu i Nadprzewodnictwa z Materią Topologiczną „MagTop” w Instytucie Fizyki PAN, gdzie badania chalcogenidków rtęci prowadzone są we współpracy z Uniwersytetem Rzeszowskim oraz Centrum Badań i Zastosowań Technologii Terahercowych „CENTERA” w Instytucie Wysokich Ciśnień PAN „Unipress”.

Trzy główne cele projektu obejmują:

- 1) Określenie struktury pasma walencyjnego w topologicznych studniach kwantowych HgTe i ustalenie, w jakim stopniu jego złożoność tłumaczy niezwykle wysoką ruchliwość nośników prądu i spektakularną kwantyzację oporności hallowskiej w niskich polach magnetycznych w reżimie transportu dziurowego, jak stwierdzono doświadczalnie na Uniwersytecie w Wuerzburgu oraz w ramach współpracy MagTop/CENTERA.
- 2) Badanie właściwości supersieci HgTe/HgSe, w szczególności poszukiwanie przejść kwantowych z fazy półprzewodnika topologicznego do półmetal Weyla oraz nowych zjawisk transportu kwantowego związanych z topologicznymi przemianami fazowymi
- 3) Poszukiwanie natury sprzężenia magnetycznego między domieszkami magnetycznymi Cr w HgTe i CdTe oraz zaprojektowanie heterostruktur, które wykażą kwantowy anomalny efekt Halla i, jak sądzimy, inne nieznanne dotychczas zjawiska.

Nasze obliczenia zostaną przeprowadzone w ramach teorii funkcjonału gęstości z wykorzystaniem relatywistycznego pakietu VASP w bazie fal płaskich i korzystając z metody rzutowania PAW. Zastosujemy zmodyfikowany funkcjonał wymiany Becke-Johnsona wraz z przybliżeniem lokalnej gęstości. Wartości przerw energetycznych i rozszczepień spinowo-orbitalnych wyznaczone tą metodą są zbliżone do wielkości doświadczalnych, co sprawia, że nasze badania przemian fazowych będą poprawne ilościowo. Niezależne wnioski o czas obliczeniowy zapewnią dostęp do superkomputerów w Interdyscyplinarnym Centrum Modelowania Uniwersytetu Warszawskiego.