

АЗЕРБАЙДЖАНСКАЯ РЕСПУБЛИКА

На правах рукописи

**НИЗКОЧАСТОТНЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ ПЛАЗМЫ И МЕЖЗОННЫЕ
ОПТИЧЕСКИЕ ПЕРЕХОДЫ В 3D ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ИЗОЛЯТОРАХ
СО СТРУКТУРОЙ ТЕТРАДИМИТА**

Специальность: 2220.01 - физика полупроводников

Отрасль науки: Физика

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени

доктора философии

Соискатель: _____ **Ализаде Эльвин Гусейнага оглы**
Научный руководитель: _____ доктор физико-математических наук,
академик **Мамедов Назим Тимур**
оглы

БАКУ – 2024

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	4
ГЛАВА I.....	14
ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ФУНКЦИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА И МЕТОДЫ ЕЁ ИССЛЕЛОВАНИЯ.....	14
1.1. Уравнения Максвелла и диэлектрическая функция твёрдых тел.....	14
1.2. Действительная и мнимая части диэлектрической функции и соотношения Крамерса-Кронига.....	18
1.3. Осцилляторная модель и критические точки для описания диэлектрической функции твёрдого тела	19
1.3.1. Осцилляторная модель. Метод модельной диэлектрической функции.	20
1.3.2. Анализ критических точек.....	22
1.4. Сравнение современных экспериментальных методов получения информации о диэлектрической функции	23
1.4.1. Спектроскопия пропускания (поглощения).....	24
1.4.2. Спектроскопия отражения.	24
1.4.3. Спектроскопическая эллипсометрия.....	25
1.5. Измерение эллипсометрических параметров с использованием спектроскопического эллипсометра с вращающимся анализатором и компенсатором в БИК-ВИД-УФ и Средней ИК областях	32
ГЛАВА II	34
ТОПОЛОГИЧЕСКОЕ СОСТОЯНИЕ. 2D И 3D ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ИЗОЛЯТОРЫ (ТИ).....	34
2.1. Топологическое состояние в ТИ	34
2.2. 2D и 3D топологические изоляторы.....	37
2.3. Структуры типа тетрадимит в качестве ТИ	39
2.5. Раман активные фононы в магнитных топологических изоляторах $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$	40
2.6. Раман активные фононы в топологических изоляторах $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x\text{TeI}$ ($x=0.$ 0.05 и 0.1) с эффектом Рашбы.	52
ГЛАВА III.....	56

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ФУНКЦИЯ ТИ В ОБЛАСТИ ЭНЕРГИЙ ФОТОНА 0.05-0.7 эВ.....	56
3.1. Эллипсометрические параметры ТИ со структурой тетрадимита в области энергий фотона в среднем и дальнем ИК.	56
3.2. Диэлектрическая функция топологических изоляторов и поглощение свободных носителей заряда.	61
3.2.1. Моделирование диэлектрической функции топологических изоляторов.	61
3.2.2. Моделирование диэлектрической функции в Bi_2Se_3 и Sb_2Te_3	63
3.2.3. Моделирование диэлектрической функции в Bi_2Te_3	68
3.2.4. Моделирование диэлектрической функции в MnBi_2Te_4	72
3.2.5. Моделирование диэлектрической функции в $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$	76
3.2.6. Моделирование диэлектрической функции в $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_{0.05}\text{Te}_4$	80
3.2.7. Моделирование диэлектрической функции в $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x\text{TeI}$	84
3.2.7. Сравнение транспортных параметров полученными из эффектов Холла и спектроскопической эллипсометрии.	88
3.3. Аномальная температурная зависимость экранированной плазменной частоты в MnBi_2Te_4	90
3.4. Дисперсия плазмон-поляритонной волны в топологических изоляторах.	100
3.5. Возбуждение и распространение плазмон-поляритона на границе раздела диэлектрик-проводник.	108
ГЛАВА IV	115
ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ФУНКЦИЯ ТИ В ОБЛАСТИ ЭНЕРГИЙ ФОТОНА 0.7-6.4 эВ.....	115
4.1. Эллипсометрические параметры ТИ со структурой тетрадимита в области энергий фотона в ближнем ИК, видимом и ультрафиолетовом диапазонах электромагнитного излучения.....	115
4.2. Критические точки и диэлектрическая функция ТИ.....	126
4.3. Диэлектрическая функция и зонная структура ТИ	132
4.3.1. Диэлектрическая функция и электронная структура слоистых соединений Bi_2Se_3 , Sb_2Te_3 и Bi_2Te_3	132

4.3.2. Диэлектрическая функция и электронная структура слоистых соединений $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$	136
4.3.2. Диэлектрическая функция и электронная структура слоистых соединений $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_{0.5}\text{Te}_4$	144
4.3.3. Диэлектрическая функция и электронная структура слоистых соединений $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x\text{TeI}$ ($x=0, 0.05$ и 0.1)	146
ВЫВОДЫ	155
СПИСОК УСЛОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ И СОКРАЩЁННЫХ СЛОВ	157
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....	159

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность работы и степень изученности темы. Одной из наиболее актуальных задач современной физики полупроводников является исследование реакции электронных состояний поверхности и объёма на внешнее электромагнитное поле в квантовых материалах, таких как немагнитные и магнитные полупроводники с сильным спин-орбитальным взаимодействием по типу Дрессельхауза и Рашбы, в том числе топологические изоляторы [12].

Бинарные полупроводники со структурой тетрадимита, такие как Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 и Sb_2Te_3 , являются немагнитными 3D топологическими изоляторами, в которых реализуется спин-холл эффект. Тройные магнитные полупроводники со структурой тетрадимита, такие как $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$, где $n = 0, 1, 2, \dots$, а также $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_{0.5}\text{Te}_4$ являются магнитными 3D топологическими изоляторами, в которых реализуется уже аномальный квантовый спин-холл эффект [69].

В обоих случаях, помимо обязательной топологической защиты электронов поверхности полупроводника от рассеяния, которая обеспечивается в немагнитных топологических изоляторах симметрией относительно обращения времени, а в случае ее нарушения в магнитных топологических изоляторах, этой же симметрией в паре с трансляцией, необходимым фактором для реализации бездиссипативного транспорта энергии (или информации) является сильное спин-орбитальное взаимодействие (СОВ) и наличие инвертированной запрещенной зоны.

Тройные полупроводники BiTeI и твердые растворы BiTeI-SbTeI со структурой несколько отличной от структуры тетрадимита, но с похожим атомным составом и рекордным спиновым расщеплением Рашбовского типа [40] являются перспективными материалами для реализации топологической фазы под давлением [30] и также представляют огромный практический интерес для спинтроники.

Реакция электронной подсистемы материала на внешнее электромагнитное поле задается уравнением Максвелла, связывающим поле

возникающее в материале с внешнем полем через коэффициент пропорциональности, который носит название диэлектрической функции (ДФ). ДФ является комплексным тензором второго порядка [59], который отражает совокупный вклад всех квантовых переходов в реакцию электронной подсистемы на внешнее электромагнитное поле и включает в себя все межзонные, межподзонные и внутризонные переходы, возможные в рамках конкретной электронной зонной структуры рассматриваемого материала.

Переходы первых двух типов происходят без изменения волнового вектора электрона, являются прямыми и пропорциональны межзонной или межподзонной плотности состояний, задаваемой конкретной электронной зонной структурой материала.

Переходы третьего типа происходят с изменением волнового вектора, являются непрямыми и связаны с поглощением энергии электромагнитной волны свободными носителями. Частота фотона, на которой происходит такое поглощение, носит название экранированной плазменной частоты. Ей соответствует нулевое значение действительной части ДФ. Начиная с этой частоты, мнимая часть ДФ с уменьшением частоты резко возрастает, отражая факт поглощения света свободными носителями. Важно подчеркнуть, что колебания плазмы свободных носителей характеризуются возбуждением плазмонов; квазичастиц, которые подчиняются статистике Бозе и проявляют себя в виде пиков в спектре мнимой части обратной ДФ, взятой со знаком минус.

В общем случае, поглощение света плазмой носителей заряда и спектр плазмонов сложным образом связаны с зонной структурой материала.

В полупроводниках существует два типа плазмонов — высокочастотные и низкочастотные. Первые, энергия которых велика по сравнению с шириной запрещенной зоны, обусловлены колебаниями плотности заряда валентных электронов. Низкочастотные же плазмоны связаны с квазисвободными электронами проводимости и дырками валентной зоны.

В собственных полупроводниках низкочастотная плазма может быть многокомпонентной, то есть состоящей из носителей заряда разного типа, которые отличаются знаком заряда (электроны и дырки), эффективной массой, номером зоны или долины (многозонные или многодолинные полупроводники). Это приводит к возникновению дополнительных мод и к существованию в электронно-дырочной плазме собственных полупроводников двух ветвей плазмонов. В одной из них электроны и дырки движутся в противофазе. В другой, более низкочастотной, электроны и дырки движутся синфазно, а закон дисперсии имеет звуковой характер (акустический плазмон).

Ситуация несколько упрощается для вырожденных или частично-вырожденных полупроводников. В этом случае, низкочастотная плазма связана либо с электронами зоны проводимости либо с дырками валентной зоны, что полностью соответствует ситуации в топологических изоляторах и Рашбовских полупроводниках, исследуемых в настоящей работе.

Все исследуемые материалы являются узкозонными полупроводниками с высокой концентрацией носителей заряда. По этой причине экранированная плазменная частота и ширина запрещенной зоны сравнимы по величине, что приводит к сложной частотной зависимости диэлектрической функции вблизи фундаментального края поглощения. Именно в этой частотной области располагаются топологически защищенные Дираковские поверхностные состояния. А их практическая функциональность, как известно, предопределяется конкретным спектром объемных электронных состояний и топологическим характером их волновых функций [12]. В связи с этим, остается целый ряд вопросов, связанных с оптическими переходами между объемными электронными состояниями вблизи запрещенной щели, нерешенных даже для уже ставших классическими, диамагнитных 3Д топологических изоляторов таких, как Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 и Sb_2Te_3 [59]. Недавно открытые и, в зависимости от температуры и состава, парамагнитные, антиферромагнитные или ферромагнитные топологические изоляторы $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$, где $n = 0, 1, 2, \dots$, а также $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_{0.5}\text{Te}_4$ и Рашбовские

полупроводники вообще слабо изучены в этом отношении. Таким образом, тематика диссертационной работы представляет интерес и является актуальной.

Предмет и объект исследования. В настоящей диссертации предметом исследования являются оптические свойства соединения типа тетрадимит, которые проявляют нетривиальные топологические свойства. Исследуемые оптические свойства являются макроскопическими проявлениями плазменных возбуждений, фононами и межзонными переходами. Соединения типа тетрадимит являются объектами исследования, они также относятся к топологическим изоляторам. Исследованы соединения Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 , $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n\text{Bi}_2\text{Te}_3$ (где $n = 0, 1, 2\dots$), MnSb_2Te_4 , $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_{0.5}\text{Te}_4$ и $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x\text{TeI}$ ($x=0, 0.05$ и 0.1).

Цель и задачи исследования. Цель данной диссертации заключается в исследовании особенностей диэлектрической функции топологически нетривиальных полупроводников, таких как Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 , $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n\text{Bi}_2\text{Te}_3$ (где $n = 0, 1, 2\dots$), MnSb_2Te_4 , $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_{0.5}\text{Te}_4$ и $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x\text{TeI}$ ($x=0, 0.05$ и 0.1), охватывающий область спектра от 0.05 эВ до 6.4 эВ энергии.

Для достижения указанной цели в работе необходимо было решить следующие задачи:

1. Провести анализ существующей литературы по теме диссертации, включая теоретические работы;
2. Провести экспериментальные исследования, включая спектроэллипсометрические измерения.
3. Восстановить диэлектрическую функцию и функцию потерь исследованных объектов.
4. В особых случаях провести детальные исследования температурной зависимости экранированной плазменной частоты.

Методы исследования:

- Спектроскопическая эллипсометрия является основным инструментом для измерения оптических параметров в широком спектре энергий фотона, в том числе и диэлектрическая функция.

- Рамановская спектроскопия.
- Измерение эффекта Холла.
- Моделирование оптических свойств с использованием осцилляторов Друде и Лоренца.
- Анализ критических точек диэлектрической функции для определения разрешенных оптических переходов.

Основные положения, выносимые на защиту:

- Диэлектрическая функция частично вырожденных исследованных топологически нетривиальных полупроводников Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 , $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ (где $n = 0, 1, 2, \dots$), MnSb_2Te_4 , $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_{0.5}\text{Te}_4$ и $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x\text{TeI}$ ($x=0, 0.05$ и 0.1) в области энергий фотона от 0.05 эВ до 6.4 эВ, которые формируется непрямыми внутризонными и прямыми межзонными оптическими переходами, а функция потерь в оптическом пределе отвечает возбуждению плазменных колебаний носителей заряда и потерям на межзонное поглощение.
- Аномальная температурная зависимость экранированной плазменной частоты в топологическом антиферромагнетике MnBi_2Te_4 является следствием смешивания электронной плотности двух зон в зоне проводимости и влияния эффекта конечных температур на распределения Ферми-Дирака.
- Смещение максимума мнимой части диэлектрической функции в области межподзонных переходов в зоне проводимости при частичной замене Bi на Sb с изменением состава x твёрдого раствора $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x\text{TeI}$ соответствует изменению величины спинового расщепления Рашбовских состояний при выполнении условия: энергия Рашбы больше энергетического положения уровня Ферми относительно дна зоны проводимости.

Научная новизна

1. Впервые получены диэлектрические функции из спектроскопических измерений в широком диапазоне энергий

фотона (0.05-6.4 эВ) для топологических изоляторов Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 , $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ (где $n = 0, 1, 2, \dots$), MnSb_2Te_4 , $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_{0.5}\text{Te}_4$ и $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x\text{TeI}$ ($x=0, 0.05$ и 0.1).

2. Спектры комбинационного рассеяния для гомологического ряда соединений $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$, ранее доступные только для систем с индексом $n < 4$, были получены для систем с $n = 4, 5$ и 6 . Обнаружено количественное несоответствие между результатами анализа точечной симметрии и экспериментальными наблюдениями числа колебательных мод, активных в комбинационном (рамоновском) рассеянии для $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ с индексом n в диапазоне $1 < n < \infty$.

3. Впервые получены диэлектрические функции при различных углах падения для твёрдых растворов $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x\text{TeI}$ $x=0, 0.05$ и 0.1 . Исследованы поглощения свободных носителей заряда (внутризонные переходы) и оптические переходы между Рашба-расщепленными ветвями зоны проводимости (межподзонные вертикальные переходы). Построена оптическая модель на основе осциллятора Друде, и получены важные параметры, такие как эффективная масса электрона, подвижность электрона и высокочастотная диэлектрическая проницаемость. Определены связанные с энергией Рашбы межподзонные переходы. Диэлектрическая функция проявляет в мнимой части широкий пик в диапазоне энергий фотонов от 0.15 до 0.4 эВ, смещение этого пика в красную область для $\text{Bi}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}\text{TeI}$ по сравнению с BiTeI является проявлением уменьшения спинового расщепления после замещения части атомов Bi атомами Sb .

4. Впервые получены дисперсии объёмных и поверхностных плазмон поляритонов в трёхмерных топологических изоляторах Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 , $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ (для $n = 0, 2$) и $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_{0.5}\text{Te}_4$.

Теоретическая и практическая значимость исследований

В диссертации теоретическая значимость исследований заключается в создании новых знаний об оптических параметрах структур типа тетрадимит.

Исследования позволяют расширять теоретическую базу, предлагать новые концепции, теории и модели, которые могут применяться в будущем для решения научных проблем связанных с физикой топологического состояния, плазмоники, метаматериалов и метаповерхностей.

Практическая значимость исследований в диссертации связана с их практическим применением. Полученные в диссертации данные могут найти применение в прикладном использовании топологических изоляторов. Знания о дисперсии, глубины проникновения и распространения плазменного возбуждения позволяют установить требования для разработки и создания систем пробирование топологического состояния. Топологические изоляторы претендуют стать базовым материалом для применения в вычислительных системах, основанных на квантовых алгоритмах, квантовой криптографии и в спинтронике.

Данные о диэлектрической функции и анализ критических точек, совместно с данными зонной структуре позволяют произвести точную подстройку зонной структуры, форсировать разработку и дизайн структур с заданными свойствами и топологическим состоянием.

Апробация и применение

Изложенные в диссертации результаты, обсуждались на международных конференциях International Conference on Ternary and Multinary Compounds ICTMC-21 2018-го года, международной конференции по спектроскопической эллипсометрии International Conference on Spectroscopic Ellipsometry ICSE-8 (Spain, Barselona, 2019), конференция, посвящённая 90-летию академика М.Н. Shahtakhtinski (Азербайджан, Баку, 2022). Значимые результаты были представлены на конференции International Conference on Spectroscopic Ellipsometry ICSE-9 (China, Beijing , 2022). Представленные материалы вызвали интерес научного сообщества, а по материал конференции в специальных выпусках международных журналов опубликованы статьи, которые получили высокие оценки рецензентов и большое число цитирований.

Название организации, в которой выполнена диссертационная работа: Диссертация была выполнена в лаборатории “Спектроскопическая эллипсометрия” Института Физики Министерства Науки и Образования Азербайджанской Республики.

Опубликованные работы. Основные материалы диссертации были опубликованы в 17 публикациях, из них 9 статей (из них 8 в иностранных журналах с импакт-фактором, из них 2 работы в журнале уровня Q1), и 5 тезисов в международных конференциях. Две опубликованные работы без соавторов (из них 1 в рецензируемом иностранном журнале с импакт-фактором). Публикации вызвали интерес в международном научном сообществе, на момент написания диссертации суммарное число цитирований по системе Google Scholar достигло 94 по всем публикациям, а персональный индекс Хирша равен 6.

Краткое содержание работы

Во **введении** были обоснована актуальность темы, описаны объекты исследования диссертации, выражены цель исследования и основные задачи, подлежащие решению, указана практическая значимость диссертации, основные результаты, была приведена научная новизна диссертации, а также разъяснено краткое содержание диссертации.

Первая глава посвящена определению диэлектрической функция и методам её исследования. Представлена и описана диэлектрическая функция в твёрдом теле для изотропного и анизотропного случая в зависимости от симметрии кристалла. Описан генезис дисперсионных особенностей диэлектрической функции в области оптических переходов. Методы моделирования и построения релевантной оптической модели для извлечения диэлектрической функции. Описаны методы извлечения диэлектрической функции из измерений на основе спектроскопии пропускания и спектроскопии отражения, их преимущества и ограничения. Подробно описан метод спектроскопической эллипсометрии, особенности и преимущества как самого прямого из всех не прямых методов получения диэлектрической функции.

Приводятся использовавшиеся в исследованиях в данной диссертации приборы спектроскопической эллипсометрии и их конфигурация.

Вторая глава посвящена топологическим изоляторам. Описан механизм возникновения топологического состояния, его природа и произведен литературный обзор текущего состояния топологической науки. Приведены особенности классификации топологических изоляторов 2D и 3D. Представлен обзор исследований топологических свойств 3D ТИ со структурой типа тетрадимит Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 , $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ (где $n = 0, 1, 2, \dots$), MnSb_2Te_4 , $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_{0.5}\text{Te}_4$ и $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x\text{TeI}$ ($x=0, 0.05$ и 0.1). В рамках данной главы описаны изучения оптически-активных фононов, в частности Раман-активных фононов.

Третья глава посвящена изучению оптических параметров, измеренных спектроскопической эллипсометрией, в области энергий фотона от 0.05 эВ до 0.7 эВ для трехмерных топологических изоляторов со структурой типа тетрадимит Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 , $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ (где $n = 0, 2$) и $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_{0.5}\text{Te}_4$ и $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x\text{TeI}$ ($x=0, 0.05$ и 0.1). Для исследованных соединений наблюдалось плазменное возбуждение обусловленное свободными носителями заряда, такими, как электроны и дырки. Представлены некоторые транспортные свойства, полученные из построенной оптической модели при помощи осцилляторов Друде и Лоренца. Показана вычисленная из экспериментальных данных дисперсия плазмон поляритонной волны.

Четвёртая глава посвящена изучению оптических параметров, измеренных спектроскопической эллипсометрией, в области энергий фотона от 0.7 эВ до 6.4 эВ для трехмерных топологических изоляторов со структурой типа тетрадимит Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 , $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ (где $n = 0, 1, 2, \dots$), MnSb_2Te_4 , $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_{0.5}\text{Te}_4$ и $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x\text{TeI}$ ($x=0, 0.05$ и 0.1). Проведен анализ критических точек диэлектрической функции. Из анализа определены разрешенные оптические межзонные переходы. Приведена зонная структура для Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 , MnBi_2Te_4 , рассчитанная из первых принципов,

проведено сравнение рассчитанной диэлектрической функцией с экспериментально измеренной.

ГЛАВА I

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ФУНКЦИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА И МЕТОДЫ ЕЁ ИССЛЕДОВАНИЯ

1.1. Уравнения Максвелла и диэлектрическая функция твёрдых тел.

Электромагнитное поле в пространстве устанавливает возбужденное состояние, которое математически представляется с помощью уравнений Максвелла, связывая вектор электрической напряжённости \mathbf{E} и магнитной индукции \mathbf{B} . Чтобы учесть влияние на электромагнитное поле среды, введена была еще одна группа параметров: плотность тока j , вектор электрической индукции \mathbf{D} и вектор магнитной напряженности \mathbf{H} .

Взаимодействие электромагнитного поля с твердым телом можно описать в рамках классической физики, базирующихся на четырёх уравнениях Максвелла, которые приведены ниже:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \quad (1.1.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (1.1.2)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (1.1.3)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = j + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (1.1.4)$$

Уравнение Максвелла устанавливают связь между пятью основными величинами \mathbf{E} , \mathbf{B} , \mathbf{D} , \mathbf{H} и j . Для среды, в частности твердого тела вводят соотношение, которые называют материальными. В частном случае твердой изотропной среды они будут иметь следующий вид:

$$j = \sigma \mathbf{E} \quad (1.1.5)$$

$$\mathbf{D} = \varepsilon \varepsilon_0 \mathbf{E} \quad (1.1.6)$$

$$\mathbf{B} = \mu \mu_0 \mathbf{H} \quad (1.1.7)$$

Здесь σ – удельная проводимость, ε – диэлектрическая проницаемость и μ – магнитная проницаемость, именно они являются фундаментальными константами, от которых зависит поведение электромагнитной волны в среде (твёрдом теле). Данные материальные уравнения справедливы в слабых полях, но уже в сильных полях необходимо будет приписывать к правым частям

члены напряженностей полей в степени большей единицы. Так как в рамках данной диссертации нелинейные оптические эффекты не изучаются, поэтому данный случай не приводится.

Применив материальные уравнения к 3-му и 4-му уравнениям Максвелла, можно получить волновые уравнения. Для электромагнитной волны $j = 0$ и $\rho = 0$. Таким образом, волновые уравнения в среде твёрдого тела примут вид

$$\Delta \mathbf{E} = \varepsilon \varepsilon_0 \mu \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} \quad (1.1.8)$$

$$\Delta \mathbf{B} = \varepsilon \varepsilon_0 \mu \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} \quad (1.1.9)$$

Это обычные волновые уравнения, которые означают, что существуют электромагнитные волны, распространяющиеся со скоростью

$$v = \frac{c}{\sqrt{\mu \varepsilon}} \quad (1.1.10)$$

где c – скорость света, а $\sqrt{\mu \varepsilon} = n$ – показатель преломления.

Для изотропных сред компоненты σ , ε и μ не зависят от направления векторов \mathbf{E} и \mathbf{B} , но в анизотропной среде компоненты σ , ε и μ являются симметричными тензорами и могут быть описаны диагональными матрицами. Диэлектрическая функция является тензором второго ранга. И материальное уравнение для электрической и магнитной компонент с учетом тензорной записи примет следующий вид:

$$\mathbf{D}_i = \varepsilon_{ij} \varepsilon_0 \mathbf{E}_i \quad (1.1.11)$$

$$\mathbf{B}_i = \mu_{ij} \mu_0 \mathbf{H}_i \quad (1.1.12)$$

Таким образом, волновое уравнение может принять более сложный вид. Магнитная проницаемость μ для большинства оптических сред в оптических частотах электромагнитных волн приближённо равно единице, следствием чего магнитное поле в оптическом диапазоне часто игнорируется.

В изотропной среде диагональные компоненты тензора равны, а недиагональные примут нулевое значение. Диэлектрические или оптические свойства кристалла могут быть охарактеризованы величинами и направлениями

трех основных диэлектрических постоянных, диэлектрических проницаемостей или диэлектрических восприимчивостей. Эти величины и направления будут, в принципе, зависеть от частоты электрического поля, но они, конечно, всегда должны соответствовать любым ограничениям, налагаемым симметрией кристалла. В таблице 1.1.1. суммировано влияние симметрии кристалла на диэлектрические свойства, представлены симметричным тензором второго ранга.

Аморфные материалы, конечно, оптически изотропны. При этом они имеют только одну компоненту тензора диэлектрической проницаемости ϵ_{xx} . Однако известно, что приготовить их в макроскопически однородном виде непросто.

Таблица 1.1.1. Влияние симметрии кристалла на диэлектрические свойства, представленные симметричными тензорами второго ранга.

Оптическая классификация	Кристаллическая симметрия	Форма тензора
Изотропная	Кубическая	$\varepsilon_{ij} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{xx} \end{pmatrix}$
Одноосная	Гексагональная Тетрагональная Ромбоэдрическая	$\varepsilon_{ij} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix}$
Двухосная	Орторомбическая	$\varepsilon_{ij} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix}$
Двухосная	Моноклинная	$\varepsilon_{ij} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & 0 & \varepsilon_{xz} \\ 0 & \varepsilon_{yy} & 0 \\ \varepsilon_{xz} & 0 & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix}$
Двухосная	Триклинная	$\varepsilon_{ij} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{xz} & \varepsilon_{yz} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix}$

1.2. Действительная и мнимая части диэлектрической функции и соотношения Крамерса-Кронига

Во время взаимодействия электромагнитной волны с твёрдым телом, выделяют три явления: отражение, пропускание и поглощение. В прозрачной немагнитной среде $\mathbf{n} = \sqrt{\varepsilon}$, и показатель преломления полностью предопределяет распространение электромагнитной волны. Тем не менее, существуют сильно поглощающие среды, в которой параметр \mathbf{n} не способен полностью описать поведение электромагнитной волны в среде. Для этого обращаются к комплексной форме записи, в которой учитывается и затухание электромагнитной волны в среде. Вводят комплексный показатель преломления $\mathbf{N} = \mathbf{n} + ik$, где k – коэффициент экстинкции, который характеризует, насколько сильно твёрдое тело поглощает электромагнитную волну.

Если $k = 0$, то электромагнитная волна распространяется в среде и среда для неё прозрачна, но в случае, когда $k > 0$ волна затухает. Глубина, на которой электромагнитная волна затухает в e – раз, называют глубиной проникновения d_p , а обратная ей величина коэффициент поглощения $\alpha = \frac{4\pi k}{\lambda}$.

Из связи между диэлектрической функцией и показателем преломления $\varepsilon = \mathbf{N}^2 = (\mathbf{n} + ik)^2 = \mathbf{n}^2 + i2\mathbf{n}k - k^2$. Таким образом, диэлектрическая функция так же является комплексной величиной, в которой выделяют действительную $\varepsilon_1 = \mathbf{n}^2 - k^2$ и мнимую $\varepsilon_2 = 2\mathbf{n}k$ компоненты (части) диэлектрической функции, в комплексной форме это записывается так.

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega) \quad (1.2.1)$$

Линейный отклик немагнитной среды на воздействие электромагнитного возбуждения полностью описывается тензором диэлектрической функции, зависящей от частоты электромагнитной волны. Между откликом и электромагнитным полем существует причинная связь, отклик не может возникнуть до того как возникнет приложенное электромагнитное возбуждение. Эта причинная связь проявляется между действительной и

мнимой части диэлектрической функцией и описывается соотношениями Крамерса – Кронига:

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\omega' \varepsilon_2(\omega')}{(\omega')^2 - \omega^2} d\omega' \text{ для действительной части}$$

и

$$\varepsilon_2(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\omega' \varepsilon_1(\omega')}{(\omega')^2 - \omega^2} d\omega' \text{ для мнимой части.}$$

Здесь P главная часть интеграла в смысле Коши.

1.3. Осцилляторная модель и критические точки для описания диэлектрической функции твёрдого тела

Диэлектрическая функция это важная универсальная фундаментальный параметр, отражающая макроскопическое проявление явлений происходящих на уровне квантовой физики. Извлеченная из измерений спектроскопической эллипсометрии, диэлектрическая функция, является ценным источником информации о квантовой природе и типе (метал или полупроводник) изучаемого объекта. Это отражение на свободных носителях заряда, фононы, межзонные переходы, экситоны и т.д. Данная глава диссертации посвящена дисперсии диэлектрической функции в области спектра межзонных оптических переходов.

Межзонный вклад в диэлектрическую функцию возникает за счёт оптических прямых переходов, за исключением несовершенства решётки (фононы, дефекты и прочее). Обусловленный межзонными переходами вклад, зависит от комбинированной плотности состояний N_d и записывается в виде выражения ниже:

$$\varepsilon_2 \approx \frac{F}{2\pi\omega} \int_{S_{\omega_{ln}=\omega}} \frac{dS_{\omega}}{|\nabla_{\mathbf{k}}\omega_{ln}|} = \frac{2\pi^2 F}{\omega} N_d(\omega_{ln} = \omega) \quad (1.3.1)$$

Здесь S_{ω} это поверхность постоянной энергии и F – сила осциллятора. Особенности в оптических параметрах (диэлектрической функции) могут возникать в энергии ω при условии того, что $|\nabla_{\mathbf{k}}\omega_{ln}|_{\omega_{ln}=\omega} = 0$, то есть, в том случае если

$$[\nabla_{\mathbf{k}}\omega_l - \nabla_{\mathbf{k}}\omega_n] = 0 \quad (1.3.2)$$

Точка в импульсном пространстве, для которой выполняется это условие, называется особенностью Ван Хова [101]. В этих точках комбинированная плотность состояний достигает максимального значения, вероятность переходов значительно возрастает. Данные особенности могут наблюдаться, точках высокой симметрии в центре либо на границе зоны Бриллюэна, вдоль линий высокой симметрии либо осей симметрии третьего, либо четвертого порядка.

Разложив волновое число ω_{ln} по степеням k_x , k_y и k_z вблизи критической точки, получается такое выражение [101]

$$\omega_{ln} = \omega_g + \frac{k_x^2}{2m_x} + \frac{k_y^2}{2m_y} + \frac{k_z^2}{2m_z} \quad (1.3.3)$$

Компоненты вектора \mathbf{k} направлены вдоль осей тензора эффективной массы \mathbf{m} . Используя это равенство можно классифицировать критические точки в зависимости от знака эффективной массы. Обозначаются они M_s , здесь s это число отрицательных масс и для трехмерных точек (3D) s принимает значения 0, 1, 2 и 3. Для случаев, когда две или одна компоненты тензора эффективной массы значительно больше другого, то критическую точку рассматривают в качестве двумерной (2D) и одномерной (1D). В данном случае, s принимает значения 0, 1 и 2 для 2D, а для 1D и s равно либо 0, либо 1. Одномерные критические точки важны при наличии магнитного поля [101].

Оптические константы в области межзонных переходов полупроводников принципиально зависят от электронной зонной структуры полупроводников. Существует несколько аналитических моделей, которые можно использовать для объяснения спектров $\varepsilon(E)$ в области межзонных переходов полупроводников, такие как, метод аппроксимации гармонического осциллятора, метод анализа критических точек и метод модельной диэлектрической функции.

1.3.1. Осцилляторная модель. Метод модельной диэлектрической функции.

Адекватная оптическая модель, которая позволяет построить физически верное описание спектральной зависимости диэлектрической функции от

энергии фотона, используют модельную диэлектрическую функцию, осцилляторы [2].

В твёрдом теле могут наблюдаться эффекты, связанные с межзонными переходами, поглощением на свободных носителях, фононы, экситоны, дефекты структур и другие эффекты. Для большинства этих явлений имеется своя соответствующая осцилляторная функция, главным образом удовлетворяющая принципу причинности Крамерса – Кронига [2]. Это существенное условие, так как диэлектрическая функция сама удовлетворяют этому принципу [2].

Спектральная зависимость диэлектрической функции от энергии фотона, обусловленная плазменным возбуждением световой волны, то есть связанная с наличием свободных носителей заряда, как дырок, так и электронов описывается осциллятором Друде [2,32,88]:

$$\varepsilon_{Drude}(E) = \frac{-\hbar^2 e^2 N \mu}{\varepsilon_0 (ie\hbar E - \mu m_{e(h)}^* E^2)} \quad (1.3.4)$$

здесь концентрация носителей заряда N , подвижность μ и эффективная масса $m_{e(h)}^*$ являются подгоночными параметрами.

Для учета межзонных переходов в рамках данной диссертации использовался осциллятор Лоренца:

$$\varepsilon_{Lorenz}(E) = \frac{A\Gamma E_C}{E_C^2 - E^2 - iE\Gamma} \quad (1.3.5)$$

здесь A – амплитуда осциллятора, Γ – уширение и E_C – энергия перехода.

Таким образом, дисперсия соединения описывалось выражением $\varepsilon(E) = \varepsilon_{Drude}(E) + \varepsilon_{Lorenz}(E)$.

Согласие между экспериментальной и подгоночно-оптимизированной диэлектрической функцией для изучаемых структур оценивается при помощи средней квадратичной ошибки. Подгонка производилась с помощью метода оптимизации Левенберга — Марквардта. В спектроскопической эллипсометрии принято считать подгонку достоверной если средняя квадратичная ошибка не превышает 20.

1.3.2. Анализ критических точек

Часто, при проведении анализа оптических спектров ошибочно обращаются к графической идентификации положения энергетических особенностей по пикам или минимумам на графике. Это в свою очередь может привести к неверному истолкованию полученных результатов эксперимента. В контексте результатов спектроскопической эллипсометрии проводят анализ критических точек.

Анализ критических точек был применён для объектов исследования настоящей диссертации. Приведённое ниже соотношение является часто используемой функцией для описания формы линии дисперсии для проведения анализа критических точек:

$$\varepsilon(E) = Ae^{-i\varphi}(E - E_n + i\Gamma)^u \quad (1.3.6)$$

Здесь A – амплитуда, E_n – энергия критической точки, Γ – уширение и φ – фазовый угол. Здесь экспонента u определяет тип критической точки и равна -0.5 для 1D критической точки, равна 0 для 2D, и равна 0.5 для 3D критической точки. Так же важен тип критической точки M_s , который определяется значениями фазового угла. Фазовый угол φ принимает значения 0° , 90° , 180° и 270° для 3D критической точки и это соответствует значениям s равной 1, 2, 3 и 0, а для 2D критической точки 0° , 90° и 180° соответствует значениям s равной 0, 1 и 2, для 1D критической точки 0° и 90° соответствует значениям s равной 0 и 1 [2]. Важно отметить, что особая точка M_0 во всех случаях соответствует краю поглощения, то есть E_g .

Если угол φ в фазовом множителе $e^{-i\varphi}$ принимает значения, кратные целому числу $\pi/2$, то форма линии соответствует переходам между некоррелированными одноэлектронными зонами, а нецелочисленные множители представляют собой включение экситонных эффектов за счет смешивания двух критических точек.

Чтобы усилить видимость особенностей, присутствующих в спектрах, и получить параметры критических точек, вычисляются спектры второй производной комплексной диэлектрической функции $\frac{d^2\varepsilon}{dE^2}$.

$$\frac{d^2\varepsilon}{dE^2} = \begin{cases} -u(u-1)Ae^{-i\varphi}(E-E_n+i\Gamma)^{u-2}, & u \neq 0 \\ Ae^{-i\varphi}(E-E_n+i\Gamma)^{-2}, & u = 0 \end{cases} \quad (1.3.6)$$

Задача по точному определению типа критической точки весьма сложная, и не всегда удаётся определить тип, преимущественно анализ позволяет определить положение смешенных критических точек.

1.4. Сравнение современных экспериментальных методов получения информации о диэлектрической функции

Задача по получению диэлектрической функции одна из основных в физике оптики. На данный момент большинство точных методов получения диэлектрической функции не являются прямыми. Практически все современные методы получения диэлектрической функции являются косвенными методами. Это связано с тем, что нет устройств или детекторов способных измерить мгновенное значение вектора электрической напряжённости электромагнитной волны в оптическом диапазоне, из-за больших значений частот. Поэтому обращаются к усреднённой по времени величине – интенсивности I :

$$I(\vec{r}, t) = \frac{1}{T} \int_t^{t+T} |\vec{S}(\vec{r}, t')| dt' \quad (1.3.7)$$

Здесь $\vec{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}$ – вектор Пойнтинга, T – период электромагнитной волны. В конечном виде интенсивность будет пропорциональна квадрату модуля электрической напряжённости $I \sim |E|^2$.

При этом существует прямой метод измерения, но крайне ограниченный в применение. Единственным прямым методом измерения является метод «Призмы» [82], который по закону Снеллиуса позволяет определить показатель преломления и экстинкции. Задача по получению качественной призмы и не шероховатого образца весьма затруднительная, к тому же данный метод хорошо работает только для прозрачных сред, так как позволяет

определить только показатель преломления, а вот для непрозрачных поглощающих сред необходимо прибегать к дополнительному способу измерения коэффициента экстинкции.

1.4.1. Спектроскопия пропускания (поглощения)

На сегодняшний день конкурирующими методами является получения диэлектрической функции, измерением пропускания (поглощения), отражения и спектроскопическая эллипсометрия.

До эллипсометрии для получения обоих компонент диэлектрической функции прибегали к спектрофотометрии, который при помощи закона Бугерта-Ламберта позволяет определять коэффициент поглощения с учётом отражения при нормальном падении R .

$$I = I_0(1 - R)^2 \times e^{-\alpha d} \quad (1.4.1)$$

$$R = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \quad (1.4.2)$$

где I_0 – интенсивность падающего на образец света и d – толщина образца. Интенсивность света, пропущенного через образец равна I , а коэффициент отражения равен R . Принимается, что толщина образца равна d . Таким образом, коэффициент поглощения α , или оптическая плотность αd , находится по следующим формулам $\alpha = \frac{1}{d} \ln \frac{I_0(1-R)}{I}$ или $\alpha d = \ln \frac{I_0(1-R)}{I}$.

Применения данного метода требуется качественная пробоподготовка для образца, необходимо получение сверхтонких образцов, что является довольно сложной задачей. Метод пропускания позволяет с высокой точностью определить величину ширины запрещенной зоны.

1.4.2. Спектроскопия отражения.

Одним из самых распространённым спектрофотометрическим методом определения действительной и мнимой частей диэлектрической функции является метод оптического отражения в очень широком спектральном диапазоне. В этом методе используются соотношения Крамерса-Кронинга. На начальном этапе измеряют коэффициент отражения $R(\hbar\omega)$ при угле падения,

близком к углу нормального падения. Затем находят амплитудный коэффициент отражения [83]:

$$r(\hbar\omega)e^{i\theta(\hbar\omega)} = \frac{N(\hbar\omega)-1}{N(\hbar\omega)+1} \quad (1.4.3)$$

Здесь $r(\hbar\omega) = \sqrt{R(\hbar\omega)}$, а $\theta(\hbar\omega)$ является сдвигом фазы и определяется на основе преобразований Крамерса-Кронинга:

$$\theta(\hbar\omega) = \frac{\omega}{\pi} \int_0^\infty \ln \frac{R(\hbar\omega)}{R(\hbar\omega_0)} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2} d\omega_0 \quad (1.4.4)$$

Разделив соотношение выше на действительную и мнимую часть можно извлечь показатель преломления и коэффициент экстинкции. Данный подход имеет серьёзный изъян, как видно интегрального соотношения вытекающего из преобразований Крамерса – Кронига, необходимо решить интеграл в широком диапазоне спектра от 0 до ∞ , таким образом, отражение нужно измерять в максимально широком диапазоне частот. Подобного рода задача довольно сложная в некоторых случаях на сегодня даже невозможная. Чем меньше диапазон, тем меньше точность метода.

1.4.3. Спектроскопическая эллипсометрия

Основной методологией для изучения оптических свойств любых сплошных сред, за исключением газов, является спектроскопическая эллипсометрия. В широком смысле эллипсометрия это раздел оптики, изучающий взаимодействие поляризованного света с различными структурами. Метод спектроскопической эллипсометрии позволяет извлечь оптические параметры, изучая изменение состояния поляризации света после взаимодействия с образцом. Схема взаимодействия приведена ниже (рисунок 1.4.1).

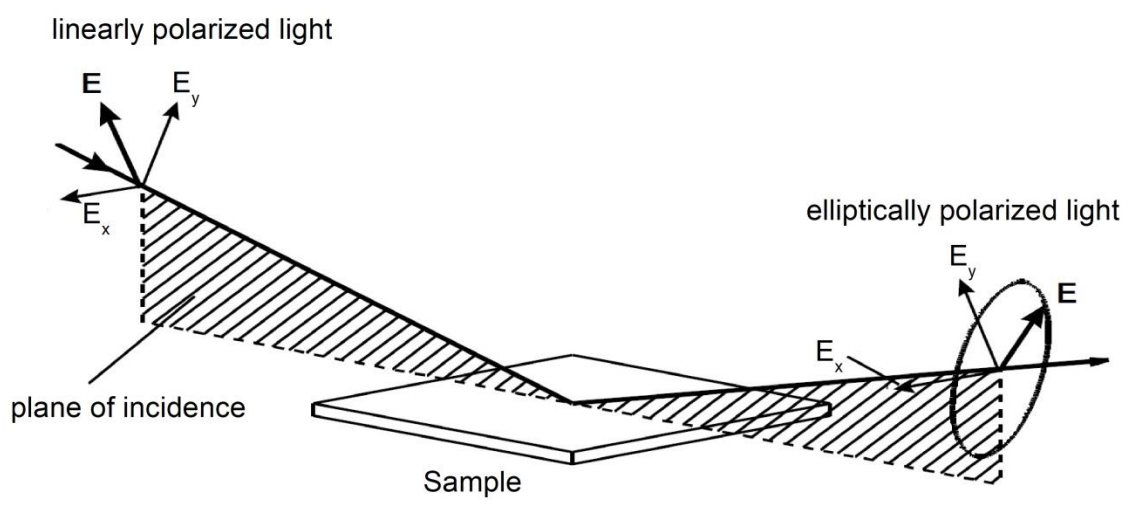


Рисунок 1.4.1. Взаимодействие поляризованного света с образцом

Всемирно признана стандартом оптического измерения, эллипсометрия даёт полную оптическую картину, в отличие от известных используемых методик измерения интенсивностей отраженного или пропущенного света, эллипсометрический подход использует состояние поляризации света за счёт измерения всех параметров Стокса S [32].

$$S = \begin{pmatrix} S_0 \\ S_1 \\ S_2 \\ S_3 \end{pmatrix} \quad (1.4.5)$$

где S_0 , S_1 , S_2 и S_3 – параметры Стокса.

Параметры Стокса характеризует состояние любого света как поляризованного так и не поляризованного.

Параметр S_1 определяет разницу в интенсивности двух ортогональных линейно поляризованных осевых компонент света как доли от полной интенсивности.

$$S_1 = I_x - I_y \quad (1.4.6).$$

Параметр S_2 определяет разницу в интенсивности двух ортогональных линейно поляризованных под 45° компонент света как доли от полной интенсивности:

$$S_2 = I_{-45} - I_{+45} \quad (1.4.7).$$

Параметр S_3 определяет разницу в интенсивности право- и лево-поляризованных круговых компонент света как доли от полной интенсивности:

$$S_3 = I_r - I_l \quad (1.4.8).$$

Параметр S_0 характеризует весь свет и равен квадратному корню суммы квадратов остальных параметров:

$$S_0 = \sqrt{S_1^2 + S_2^2 + S_3^2} \quad (1.4.9).$$

Основными параметрами эллипсометрии являются эллипсометрические углы ψ и Δ , они имеют следующую связь с параметрами Стокса:

$$S_1 = -\cos 2\psi \quad (1.4.10)$$

$$S_2 = \cos 2\psi \sin \Delta \quad (1.4.11)$$

$$S_3 = -\sin 2\psi \sin \Delta \quad (1.4.12)$$

В современных эллипсометрах эллипсометрические углы ψ и Δ определяются из параметров Стокса. Эллипсометрические углы ψ и Δ характеризуют амплитудное соотношение и разность фаз для p и s поляризованных волн, соответственно. Основное уравнение эллипсометрии имеет следующий вид [32]:

$$tg\Psi e^{-\Delta i} = \frac{r_p}{r_s} \quad (1.4.13)$$

Здесь r_p и r_s – коэффициенты Френеля.

Так как, исследуемые структуры типа тетрадимит с гексагональной и ромбоэдрической симметрией решетки являются одноосными оптически анизотропными кристаллами, то эллипсометрия указанных структур должно проводиться с соответствующими поправками на анизотропию. Тензор диэлектрической функции ε_{ij} , в таком случае, для данных структур примет вид [32]:

$$\varepsilon_{ij} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} \quad (1.4.14)$$

здесь две диагональные перпендикулярные компоненты тензора диэлектрической функции одинаковые $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{\perp}$, а третья параллельная компонента $\varepsilon_{zz} = \varepsilon_{\parallel}$ отличается от двух других $\varepsilon_{\parallel} \neq \varepsilon_{\perp}$. Обозначения \perp и \parallel являются обозначениями направления вектора электрической напряженности E относительно оптической оси C .

Основное уравнение эллипсометрии для перпендикулярной и параллельной ориентации относительно оптической оси принимает следующий

вид: $\frac{r_{pp}^{\perp}}{r_{ss}^{\perp}} = \tan \psi_{\perp} e^{i\Delta_{\perp}}$ и $\frac{r_{pp}^{\parallel}}{r_{ss}^{\parallel}} = \tan \psi_{\parallel} e^{i\Delta_{\parallel}}$. Коэффициенты Френеля для s и p

поляризацій записываются следующим образом:

для перпендикулярной ориентации [32]

$$r_{PP}^{\perp} = \frac{\varepsilon_{\perp} \cos \varphi - \sqrt{\varepsilon_{\perp} - \sin^2 \varphi}}{\varepsilon_{\perp} \cos \varphi + \sqrt{\varepsilon_{\perp} - \sin^2 \varphi}} \quad (1.4.15)$$

$$r_{SS}^{\perp} = \frac{\cos \varphi - \sqrt{\varepsilon_{\parallel} - \sin^2 \varphi}}{\cos \varphi + \sqrt{\varepsilon_{\parallel} - \sin^2 \varphi}} \quad (1.4.16)$$

и для параллельной ориентации [32]

$$r_{pp}^{\parallel} = \frac{\sqrt{\varepsilon_{\perp} \varepsilon_{\parallel}} \cos \varphi - \sqrt{\varepsilon_{\perp} - \sin^2 \varphi}}{\sqrt{\varepsilon_{\perp} \varepsilon_{\parallel}} \cos \varphi + \sqrt{\varepsilon_{\perp} - \sin^2 \varphi}} \quad (1.4.17)$$

$$r_{SS}^{\parallel} = \frac{\cos \varphi - \sqrt{\varepsilon_{\perp} - \sin^2 \varphi}}{\cos \varphi + \sqrt{\varepsilon_{\perp} - \sin^2 \varphi}} \quad (1.4.18)$$

Диагональные компоненты тензора диэлектрической функции анизотропного соединения могут быть получены на основе эллипсометрических измерений в двух конфигурациях относительно оптической оси S . В одном случае, плоскость падения света должна быть перпендикулярна, а в другом случае параллельна оптической оси. Из системы двух комплексных главных уравнений эллипсометрии методом итераций находятся перпендикулярная и параллельная компоненты тензора диэлектрической функции.

Имеется большое разнообразие конфигураций эллипсометров на сегодняшний день. Сегодня эллипсометры делятся на две категории: с вращательными оптическими элементами или с фотоэластичными модуляторами.

Среди эллипсометров (рисунок 1.4.2.) с вращающимися оптическими элементами последнее время все актуальнее стала конфигурация RCA (Rotating-Analysator-Compensator) с вращающимся анализатором и компенсатором. Данная конфигурация позволяет выполнить полный оптический эксперимент, что позволяет извлечь информацию обо всех параметрах Стокса. Основными поляризационными элементами RCA эллипсометра являются волновая пластинка (компенсатор) и линейный поляризатор. Компенсатор дает разность фаз δ для электрических векторов, параллельных и перпендикулярных. Интенсивность света I_t прошедшего через оптическую систему будет удовлетворять следующему соотношению [15]:

$$I_t(\alpha, \beta, \delta) = \frac{1}{2} [I + (M \cos 2\beta + C \sin 2\beta) \cos 2(\alpha - \beta) + [(C \cos 2\beta - M \sin 2\beta) \cos \delta + S \sin \delta] \sin 2(\alpha - \beta)] \quad (1.4.19)$$

где α – поворот компенсатора, β – поворот анализатора (линейный поляризатор), I, M, C, S – не нормализованные параметры Стокса соответствующие S_0, S_1, S_2 и S_3 .

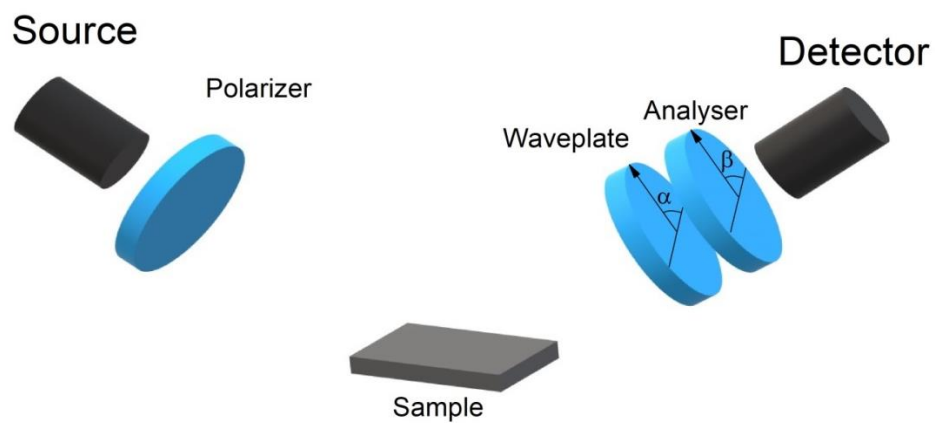


Рисунок 1.4.2. Схема анализа состояния поляризации в RСА эллипсометре

1.5. Измерение эллипсометрических параметров с использованием спектроскопического эллипсометра с вращающимся анализатором и компенсатором в БИК-ВИД-УФ и Средней ИК областях

Эллипсометрические исследования проводили при комнатной температуре с помощью эллипсометров марки J.A. Woollam IR-VASE и M2000DI (Рисунок 1.5.1) [1,6-11,17,39,41]. Используемые эллипсометры соответствуют конфигурации RCA. Измерения проводились в диапазоне энергий фотонов от 0.05 до 6.3 эВ в воздушной среде при комнатной температуре.

Исследовались образцы, отслоенные от объемных слитков с перпендикулярной к оптической оси ориентацией и зеркальной поверхностью. Плоскость падения инфракрасного света перпендикулярна поверхностям. Диэлектрическая проницаемость ($\varepsilon = \varepsilon_1 - i\varepsilon_2$), извлеченная с помощью эллипсометрических параметров Ψ и Δ , не зависела от угла, следовательно, соответствовала компоненте $\mathbf{E} \perp \mathbf{C}$ (\mathbf{E} – электрический вектор падающего света, \mathbf{C} – оптическая ось) тензора диэлектрической функции. Это связано с тем что, при измерениях плоскость падения света преимущественно была перпендикулярна поверхности слоев, а оптическая ось параллельна нормали относительно поверхности слоёв, то получаемые измерения преимущественно соответствуют случаю перпендикулярной поляризации вектора электрической напряженности оптической оси $\mathbf{E} \perp \mathbf{C}$ [32,59].

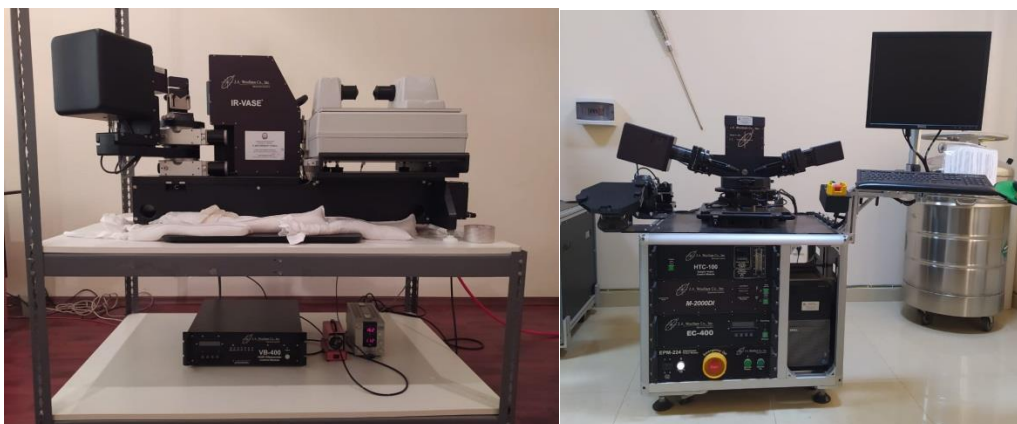


Рисунок 1.5.1. Спектроскопические эллипсометры J.A. Woollam IR-VASE (справа) и M2000DI (слева)

ГЛАВА II

ТОПОЛОГИЧЕСКОЕ СОСТОЯНИЕ. 2D И 3D ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ИЗОЛЯТОРЫ (ТИ).

2.1. Топологическое состояние в ТИ

Нобелевская премия по физике 2016 года была присуждена Дэвиду Дж. Таулессу, Ф. Дункану М. Холдейну и Дж. Майклу Костерлицу «за теоретические открытия топологических фазовых переходов и топологических фаз материи». В 1972 г. Костерлиц и Таулесс идентифицировали новый тип фазового перехода в двумерных (2D) системах, где обнаружено, что топологические дефекты играют решающую роль в управлении так называемым фазовым переходом Костерлица-Таулесса [49,50]. Это имеет решающее значение для понимания квантовых явлений при очень низких температурах в некоторых типах магнитов, сверхпроводящих и сверхтекучих пленках. В 1982 г. концепции топологического описания были использованы Таулессом и его сотрудниками для объяснения квантования холловской проводимости в двумерных электронных газах, что привело к появлению ключевой характеристики, известной как число Таулесса-Комото-Найтингел-Ниджа (ТКНН) [87]. В сильном внешнем магнитном поле [46] вызываются квантование уровней Ландау и квантовый эффект Холла (КЭХ), которые проявляются в исчезающей продольной проводимости, но не равной нулю квантованной Холловской проводимости, что приводит к состоянию изолирующего объема, но с краем металлической проводимости. Амплитуда квантованной Холловской проводимости выражается в единицах $\frac{e^2}{h}$ и связана с числом ТКНН или числом Черна, которое топологически инвариантно, пока объемная запрещенная зона остается открытой, что отражает топологическую природу КЭХ, т.е. проводимость квантуется при постоянных значениях. В результате металлическое краевое состояние устойчиво к слабому беспорядку, подобному немагнитным дефектам. Эти новаторские открытия представили новые физические принципы и заложили прочную основу для понимания

нового типа топологически обусловленных фазовых переходов в 2D-материалах.

Топологические изоляторы представляют собой новое квантовое состояние материи, которое характеризуется своеобразными краевыми или поверхностными состояниями, проявляющимися из-за топологического характера объемных волновых функций. Прогресс в физике конденсированного состояния часто обусловлен открытием новых материалов. В связи с этим особое значение имеют материалы, обладающие уникальными квантово-механическими свойствами. Топологические изоляторы представляют собой класс таких материалов, и в настоящее время создали всплеск исследовательской деятельности. Поскольку топологические изоляторы касаются качественно нового аспекта квантовой механики, то есть топологии гильбертова пространства, они открыли новое окно для понимания сложной работы природы. Другое общепринятое определение для топологических изоляторов — это материалы, которые имеют объемную запрещенную зону, как и обычные изоляторы, но имеют защищенные проводящие состояния на их краях или поверхности. Эти состояния возможны из-за комбинации спин-орбитальных взаимодействий и симметрии обращения времени.

Топологические изоляторы имеют два особенных свойства: устойчивость к возмущениям и наличие без щелевого граничного состояния. Постоянные возмущения, на сколько бы они сильны не были, не могут перевести их в топологически тривиальное состояние без перекрытия запрещенной зоны. Это непосредственно приводит ко второму свойству: граница между топологическим изолятором и топологически тривиальным материалом всегда имеет бесщелевые состояния на границе раздела фаз [44].

Топологический материал математически характеризуется ненулевым топологическим инвариантом. Самый простой и поучительный случай — это число Черна равное единице для двумерной системы, которое можно построить с помощью теории фазы и кривой Берри. Ниже подробнее разберем это.

Рассмотрим систему, гамильтониан которой $H(\mathbf{R})$ гладко зависит от некоторого набора параметра \mathbf{R} , также зависящий от времени t . Перемещение системы между временами $t = 0$ и $t = t'$ может быть представлено как движение по замкнутому пути $\mathbf{R}(t)$ в пространстве параметров $H(\mathbf{R}(t))$ в котором $\mathbf{R}(0) = \mathbf{R}(t')$.

Соответствующий ему базис собственных состояний E_n и $|\mathbf{n}\rangle$ также зависящих от \mathbf{R} записывается в данном виде $H(\mathbf{R})|\mathbf{n}\rangle = E_n(\mathbf{R})|\mathbf{n}\rangle$.

В квантовой системе в n -ом собственном состоянии адиабатическая эволюция гамильтониана приводит к тому, что система остается в n -м собственном состоянии гамильтониана, при этом приобретая фазовый множитель. Приобретенная фаза соответствует геометрической фазе или фазы Берри. В контексте топологических изоляторов, параметром \mathbf{R} является импульс, хотя геометрическая фаза или фаза Берри также может быть определена с помощью других параметров, к примеру, внешним полем.

Вывод выражения для фазы Берри подробнее описан в работе [16], в рамках данной диссертации приведём лишь саму формулу:

$$\varphi^B = i \oint \langle \mathbf{n}(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} | \mathbf{n}(\mathbf{R}) \rangle d\mathbf{R} \quad (2.1.1)$$

Вводится параметр связности или вектор-потенциал Берри $A(\mathbf{R})$

$$A(\mathbf{R}) = \langle \mathbf{n}(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} | \mathbf{n}(\mathbf{R}) \rangle \quad (2.1.2)$$

С помощью неё получают параметр именуемый кривизной Берри Ω_{ij} .

$$\Omega_{ij} = \partial_i A_j - \partial_j A_i \quad (2.1.3)$$

Топологически нетривиальные полупроводники характеризуются числом Черна C , вычисляемого поверхностным интегралом кривизны Бери $C = \frac{1}{2\pi} \iint \sum_{ij} \Omega_{ij}(\mathbf{R}) d\mathbf{R}_i \wedge d\mathbf{R}_j$, значение которого связано с величиной квантового эффекта Холла, которые, согласно могут возникать в таких системах. Многие открытые к настоящему времени топологические соединения имеют число Черна равной 1 или 2, но теоретически возможны и более высокие значения.

Значимость числа Черна состоит именно в том, что изменение числа Черна требует прерывистого перехода между зонными структурами.

Это верно и для границы между материалами с разными топологическими инвариантами: любой переход от материала с ненулевым числом Черна к топологически тривиальному состоянию (с числом Черна равным 0) требует нарушения предположения, что система не вырождена. В какой-то момент перехода, число Черна должно перейти от одного значения к другому. Это может произойти только в том случае, если зонные структуры станут в этом направлении вырожденными. Для топологического изолятора (с энергией Ферми между двумя рассматриваемыми зонами) это приводит к возникновению бесщелевых краевых состояний [79]. Этот никак не зависит от структуры границы, поэтому краевые состояния не могут быть подавлены/«локализованы» беспорядком или сильными потенциалами.

Очень редко бывает так, что валентная зона и зона проводимости в топологическом изоляторе невырожденные, как это необходимо.

Холловская проводимость в двумерной системе задаётся интегралом кривизны Берри по всей зоне Бриллюэна, которая также называется ТКНН-инвариантом. При условии, того что уровень Ферми находится внутри запрещённой зоны, между зоной проводимости и валентной зоной, эта связь выглядит следующим образом [14].

$$\sigma_{xy} = C \frac{e^2}{h} \quad (2.1.4)$$

2.2. 2D и 3D топологические изоляторы

Топологическая наука является тем случаем, когда из развития математических абстракций, применённых к реальным физическим объектам, возникло физическое предсказание, а за ней экспериментальное подтверждение. Топологические изоляторы подразделяются на два класса 2D и 3D топологические изоляторы.

Впервые, существование бесщелевого 2D-состояния Дирака за счёт инверсии зон, была показана на контакте в гетероструктурах PbTe/SnTe [70] и HgTe/CdTe[90]. В неоднородной структуре, представляющей собой контакт двух полупроводников с взаимно инвертированными зонами, возникают

двумерные невырожденные электронные состояния. Инверсия зон возникает в тонкой прослойке твёрдого раствора в гетероструктуре. Таким образом, впервые были получены класс двумерных топологических изоляторов. Двумерный топологический изолятор представляет собой гетероструктуры с инверсионным слоем полупроводника проявляющий спиновой квантовый эффект Холла, и близкий к нему целочисленный квантовый эффект Холла.

Квантовый спиновой эффект Холла относится к одномерным краевым состояниям двумерного образца, но этот эффект можно обобщить на три измерения. В этом случае вместо одномерных спин-поляризованных краевых состояний двумерного материала наблюдаются двумерные поверхностные состояния трехмерного материала. Основная часть этого материала (объём) является изолятором, но на поверхности существует двумерное проводящее состояние. Подобно квантовому спиновому эффекту Холла, электроны, движущиеся в противоположных направлениях, имеют противоположные спины. Эти материалы называются трехмерными топологическими изоляторами. Типичными примерами являются Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , а также ряд других родственных им материалов.

Поверхностные электроны в топологических изоляторах обладают рядом необычных характеристик. Во-первых, подобно электронам в графене, они ведут себя как ультррелятивистские частицы. Трехмерный (3D) топологический изолятор содержит на своей поверхности спин-поляризованные двумерные безмассовые фермионы Дирака [35]. График зависимости энергии топологических электронов от их импульса образует конус, известный как конус Дирака. Во-вторых, как и в описанных выше краевых состояниях графена, спин поверхностных электронов в топологических изоляторах ориентирован перпендикулярно их импульсу. Наконец, в отсутствие магнитных примесей спины на поверхности не переворачиваются, и это состояние поверхности устойчиво к умеренному беспорядку. Пересечение на вершине конуса Дирака (точка Дирака) защищено симметрией обращения времени [35].

2.3. Структуры типа тетрадимит в качестве ТИ

Полупроводники на основе тяжелых элементов, таких как Bi, Sb, Te и Se, которые кристаллизуются в ромбоэдрической структуре относятся к структуре типа тетрадимит. Сам тетрадимит это минерал с формулой $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{S}$.

Тетрадимиты имеют общую формулу M_2X_3 , в которой элемент M представляет собой тяжелый металл основной V группы элементов, а элемент X представляет собой халькогенид из VI группы. В качестве элементов для получения этих структур являются $\text{M} = \text{As}, \text{Sb}$ и Bi , а $\text{X} = \text{S}, \text{Se}$ и Te . Эти элементы имеют близкие электроотрицательности, что теоретически способствует инверсии зон, но на практике неблагоприятно для контроля дефектов состава материала. В материалах с инвертированными энергетическими зонами, электроны в поверхностных состояниях становятся топологически защищенными. Также, это сходство в электроотрицательности приводит к появлению дефектов замещения (то есть атомов M на X или наоборот), которые оказывают воздействие в качестве доноров либо акцепторов.

Соединения Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 , $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ (где $n = 0, 1, 2, \dots$) и $\text{MnSb}_2\text{Te}_4 \cdot n\text{Sb}_2\text{Te}_3$ (где $n = 0, 1, 2, \dots$) являются структурами типа тетрадимит. Экспериментальное подтверждение наличия топологической фазы в Bi_2Se_3 и в Bi_2Te_3 было обнаружено в 2009 году в работах [38,21]. В 2012 году в работе [48] при помощи ARPES было обнаружено наличие Дираковского конуса для Sb_2Te_3 .

Это дало старт интенсивному возвращению к этим материалам и исследованию их в качестве топологических материалов. Вехой стало открытие магнитных топологических изоляторов [69].

Как было указано выше, магнитные примеси убивают топологическое состояние, при этом любой другой дефект для топологического состояния безразлично, это так называемая топологическая защита. Обычное внедрение магнитной примеси приводит к сильно неоднородным магнитным и электронным свойствам этих материалов, запрещая наблюдение важных

квантовых эффектов. MnBi_2Te_4 собственный магнитный топологический изолятор, стехиометрически хорошо упорядоченное магнитное соединение, в котором был получен Дираковский конус, также в точке Дирака получена была щель. Это стало подтверждением наличия топологического состояния в этой структуре, что в свою очередь дала старт активному интересу всей серии структур $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n\text{Bi}_2\text{Te}_3$.

В данной работе исследуемые объемные структуры типа тетрадимита соединений Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 , $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ (где $n = 0, 1, 2\dots$), MnSb_2Te_4 , $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_{0.5}\text{Te}_4$ и $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x\text{TeI}$ ($x=0, 0.05$ и 0.1), были охарактеризованы и паспортизированы с помощью рентгеновской дифрактометрии и рамановской спектроскопией. Детали технологического режима, подробное описание структуры, рентгеновская дифрактометрия и рамановская спектроскопия (спектроскопия комбинационного рассеяния) для использованных образцов описаны в работах [1,6,11,59,60,100].

2.5. Раман активные фононы в магнитных топологических изоляторах $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$

Фононы могут оказывать влияние на топологически защищенные состояния в топологических изоляторах, хотя преимущественно это влияние не прямое. Они могут вызывать рассеяние электронов, которые находятся в топологически защищенных состояниях на поверхности материала, влиять на дисперсию краевых состояний при взаимодействии с электронами. Рассеяние на фононах может приводить к потере топологической защиты и, следовательно, к ухудшению свойств материала [36].

Однако, существует также и обратный эффект, когда фононы могут усиливать топологически защищенные состояния. Это происходит, когда фононы вызывают перераспределение электронов на поверхности материала и, таким образом, создают более благоприятные условия для топологических защищенных состояний.

Изучение взаимодействия фононов и топологических изоляторов важно для развития новых материалов и устройств на их основе. Для этого используются различные методы, включая рамановскую спектроскопию и другие экспериментальные техники, которые позволяют изучать взаимодействие фононов и топологических защищенных состояний в материалах.

Рамановское рассеяние для гомологического ряда соединений $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ исследовали с помощью конфокального микроспектрометра Nanofinder 30 производства Tokyo Instruments [1,97]. В качестве источника возбуждения использовалась вторая гармоника (532 нм) лазера на Nd: иттрий-алюминиевом гранате с максимальной выходной мощностью 10 мВт, диаметр пучка в поперечном сечении составлял 4 мкм. Дифракционная решетка с 1800 штрихами на 1 мм обеспечивала спектральное разрешение 0.5 см^{-1} . Спектры были зарегистрированы с помощью камеры устройства с зарядовой связью для счета фотонов, охлажденной до -100°C ; время экспозиции обычно составляло 1 мин. Сигнал отфильтровывался с помощью краевых фильтров LP03-532RU-50 (фирма Semrock). Спектры комбинационного рассеяния были сняты в геометрии обратного рассеяния при комнатной температуре.

Согласно проведенному анализу узловой симметрии в работе [11] на основе структурных данных, число колебательных мод, активных в комбинационном рассеянии $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$, должно возрастать с ростом n от 0 до 6 (табл. 2.5.2., третий ряд) из-за роста числа атомов в элементарной ячейке.

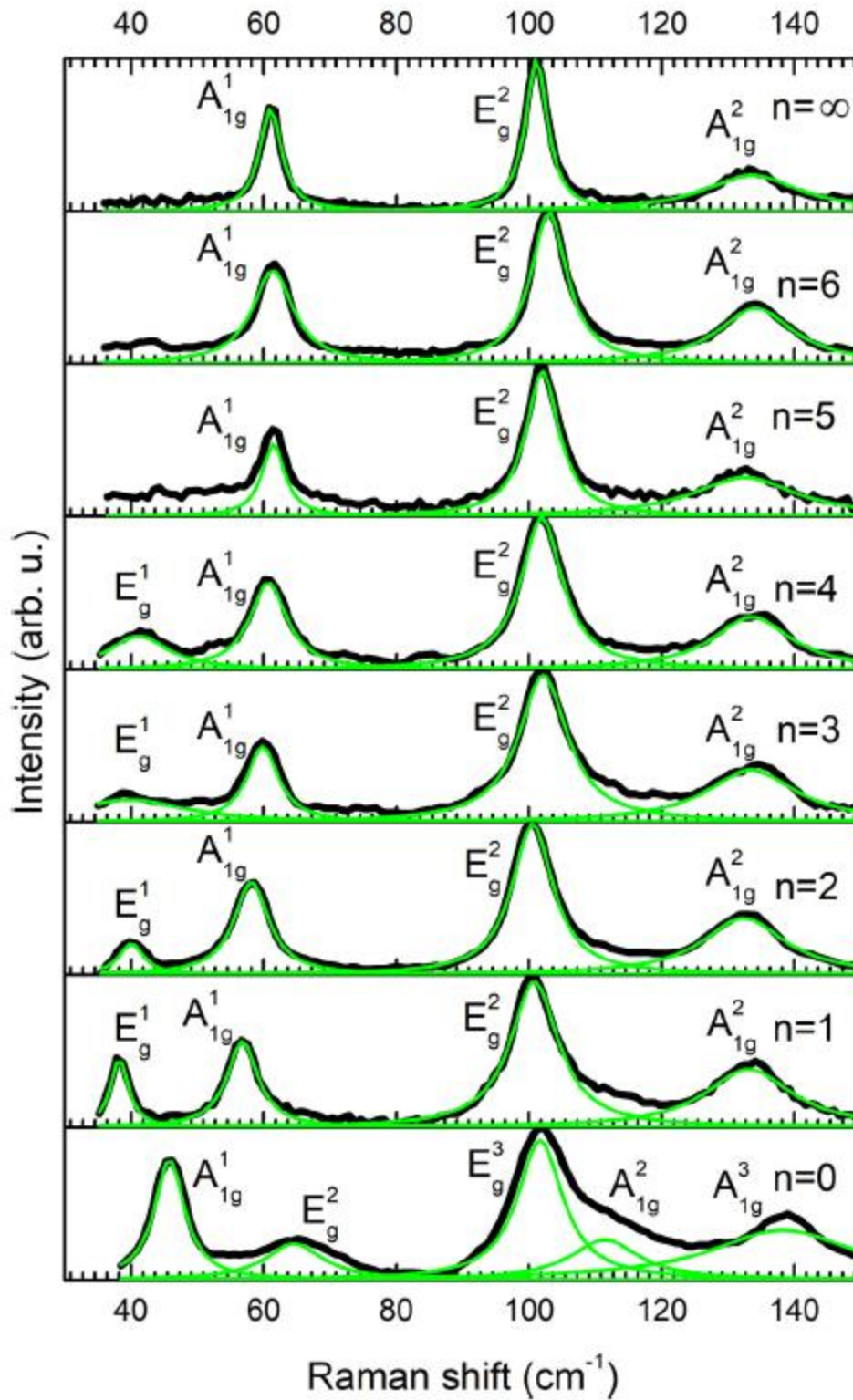


Рисунок 2.5.1. Нормированные спектры комбинационного рассеяния света (черные линии) $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ для $n = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6$ и ∞ . Результаты деконволюции показаны зелеными линиями.

Как показано на рисунке 2.5.1. с нормированными графиками экспериментальных спектров (черные линии) и разложенными на функции Лоренца спектрами (зеленые линии) $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$, на самом деле количество этих мод не соответствует приведенным выше ожиданиям. В то время как количество линий в рамановских спектрах концевых членов, MnBi_2Te_4 ($n = 0$) и Bi_2Te_3 ($n = \infty$), соответствует количеству линий, полученному анализом точечной симметрий для объемных кристаллов, это число для остальных $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ членов постоянна и равна 4 независимо от величины n . Не указанная на рисунке 2.5.1 мода E_g^1 для MnBi_2Te_4 ($n = 0$) была экспериментально обнаружена в нескольких недавних работах [25,55], в результате чего общее количество наблюдаемых линий в спектре комбинационного рассеяния достигло 6. Исчезновение моды E_g^1 из спектров комбинационного рассеяния $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ с $n = 5, 6$ и содержание схожего числа (4) линий на рисунке 2.5.1. обусловлено аппаратными ограничениями.

Например, для MnBi_4Te_7 ($n = 1$) наблюдаемы только 4 моды (рисунок 2.5.1.) из ожидаемых 12 мод (табл. 2.5.1). Для остальных членов $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ с $1 < n < \infty$ разница между ожидаемым и действительным числом мод по сравнению с ними еще более существенна.

Таблица 2.5.1. Число атомов в элементарной ячейке, число мод симметрии A_{1g} и E_g и общее количество мод для каждого члена $MnBi_2Te_4 \cdot n(Bi_2Te_3)$. E_g мода дважды вырождена

Compound	Число атомов в элементарной ячейке	Моды	Число мод
Bi_2Te_3	5	$2A_{1g} + 2E_g$	4
$MnBi_2Te_4$	7	$3A_{1g} + 3E_g$	6
$MnBi_4Te_7$	12	$6A_{1g} + 6E_g$	12
$MnBi_6Te_{10}$	17	$8A_{1g} + 8E_g$	16
$MnBi_8Te_{13}$	22	$11A_{1g} + 11E_g$	22
$MnBi_{10}Te_{16}$	27	$13A_{1g} + 13E_g$	26
$MnBi_{12}Te_{19}$	32	$16A_{1g} + 16E_g$	32
$MnBi_{14}Te_{22}$	37	$18A_{1g} + 18E_g$	36

Таблица 2.5.2. Полная ширина на уровне половины высоты линий комбинационного рассеяния колебательных мод $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ при различных n .

n	Полная ширина на уровне половины высоты					
	E_g^1	E_g^2	E_g^3	A_{1g}^1	A_{1g}^2	A_{1g}^3
0	-	10.5	8.3	5.54	12.6	26.6
1	3.2	8.7	-	5.7	15.8	-
2	4.5	7.5	-	6.4	15.2	-
3	21	8.9	-	5.8	16.5	-
4	10	7.6	-	6.8	14.4	-
5	-	6.1	-	4.2	19.1	-
6	-	6.7	-	7.4	13.9	-
∞	-	4	-	4.0	17.4	-

Ширина линии, приведенная в таблице 2.5.2. для каждой моды, наблюдаемой в спектрах комбинационного рассеяния на рисунке 2.5.1., свидетельствует об отсутствии какого-либо уширения линий комбинационного рассеяния. Такое уширение могло бы проявиться, если бы число линий комбинационного рассеяния увеличивалось бы с ростом n . Другими словами, рамановские моды на рисунке 2.5.1. являются единственными нормальными Раман активными колебаниями в $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$.

Для хорошо изученного MnBi_2Te_4 ($n = 0$) [4,24,25,47,55,71,76], состоящего только из семислойных пакетов, обозначения симметрии мод колебаний на рисунке 2.5.1. совпадают с обозначениями в недавно вышедшей работе [25], где эти симметрии были подтверждены измерениями поляризации мод. Начиная с MnBi_4Te_7 ($n = 1$), и далее для всех членов, содержащих как семислойные пакеты, так и пятислойные пакеты, включая Bi_2Te_3 ($n=\infty$), симметрия каждой моды на рисунке 2.5.1. соответствует, симметриям из теоретической работы [23], в которой рассматривались Раман активные моды отдельно лежащих пятислойных пакетов Bi_2Te_3 . Причиной этого является очень близкое соответствие между результатами, рассчитанными для числа n пятислойных пакетов Bi_2Te_3 , и полученными для $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ с тем же индексом n . Такое соответствие становится очевидным после тщательного сопоставления полученных данных комбинационного рассеяния с имеющимися результатами для Bi_2Te_3 .

Поведение частоты Раман-активных мод при изменении n в $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ представлено на рисунке 2.5.2.. Наиболее заметное изменение частоты происходит в пределах первых двух членов гомологического ряда соединений $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ с $n = 0$ и $n = 1$. Как видно из рисунка 2.5.2., кроме частот E_g^2 и E_g^3 , частоты мод с одинаковой симметрией в MnBi_2Te_4 и MnBi_4Te_7 заметно отличаются друг от друга в близком частотном диапазоне. (Обратите внимание, что, несмотря на одинаковую симметрию, поля смещения мод различны.) На рисунке 2.5.2. не закрашенным кружком показано значение частоты моды E_g^1 MnBi_2Te_4 ($n = 0$) из работ [25,47,55].

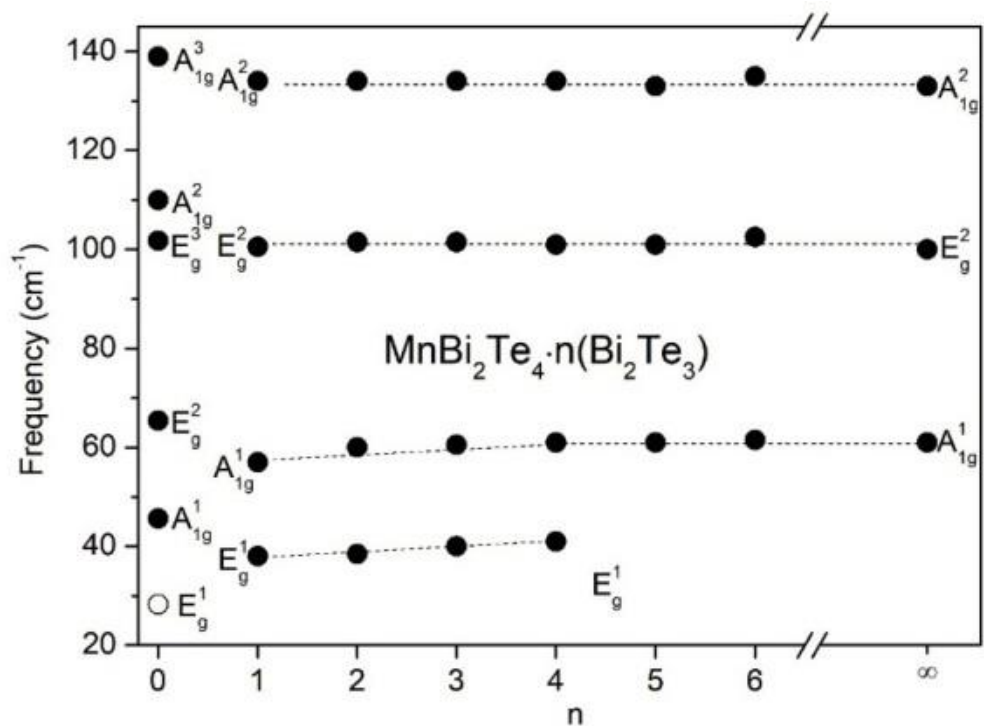


Рисунок 2.5.2. Зависимость частоты мод, наблюдаемых в спектрах комбинационного рассеяния, от числа (n) пятислойных пакетов, вставленных между семислойными пакетами в $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$. Штриховые линии соединяют частоты мод с близкими полями смещений. Не закрашенный кружок на рисунке 2.5.2. указывает сообщаемое значение [25,47,55] частоты моды E_g^1 в MnBi_2Te_4 ($n = 0$). Моды с одинаковой симметрией для $n = 0$ (MnBi_2Te_4) и $n = 1$ (MnBi_4Te_7) не связаны из-за разных полей смещения, как пояснено в тексте.

Эта мода соответствует плоскостным синфазным смещениям атомов Vi и Te в семислойном пакете. Другой плоскостной синфазной модой MnVi_2Te_4 является мода A_{1g}^1 . Частоты плоскостных синфазных аналоги этих мод в MnVi_4Te_7 ($n=1$) заметно выше и подчиняются соотношению $\omega_{n=1}/\omega_n=0 \approx [(2m_{\text{Te}}+m_{\text{Vi}})/(m_{\text{Te}}+m_{\text{Vi}})]^{1/2}$, где m_{Te} и m_{Vi} — атомные массы атомов Te и Vi . В таком случае низкочастотные моды MnVi_4Te_7 , E_g^1 и A_{1g}^1 , можно приписать к смещениям атомов Te и Vi в пятислойном пакете Vi_2Te_3 , а не в семислойном пакете, как в случае для MnVi_2Te_4 . Вопреки ожиданиям, количество мод, наблюдаемых после введения всего одного пятислойного пакета Vi_2Te_3 между семислойными пакетами MnVi_2Te_4 с образованием соединения MnVi_4Te_7 , не увеличивается, а падает до количества мод, наблюдаемых для Vi_2Te_3 (табл. 2.5.1). Важно отметить, что количество мод и их симметрия для соединений с 1 и большим числом пятислойных пакетов Vi_2Te_3 и объемного соединения Vi_2Te_3 одинаковы, а низкочастотные моды 1 пятислойного пакета Vi_2Te_3 смещены в сторону низких частот по сравнению с их объемными аналогами [23]. Согласно рисунку 2.5.3., для низкочастотных мод E_g^1 и A_{1g}^1 в структурах с $n > 0$ наблюдается достаточно близкая дисперсия.

Другими словами, должно быть взаимно однозначное соответствие между полученными результатами для структур с $n = 1, 2, 3, 4, 5$ и 6 и результатами для 1, 2, 3, 4, 5 и 6 пятислойных пакетов объемного соединения Vi_2Te_3 . Результаты практически совпадают с результатами, полученными Zhao в [96] для 2–11 пятислойных пакетов Vi_2Te_3 на подложке SiO_2/Si .

В соответствии с последним результатом низкочастотная мода E_g^1 появилась только для 2 пятислойных пакетов Vi_2Te_3 и уже не наблюдается для пятислойных пакетов с большим числом, что подтверждает затухание интенсивности этой моды с ростом индекса n в данном случае. Другим совпадением является смещение в высокие частоты моды A_{1g}^1 с увеличением числа пятислойных пакетов от 2 до 4, а также установление фиксированной частоты этой моды для большего числа пятислойных пакетов [96].

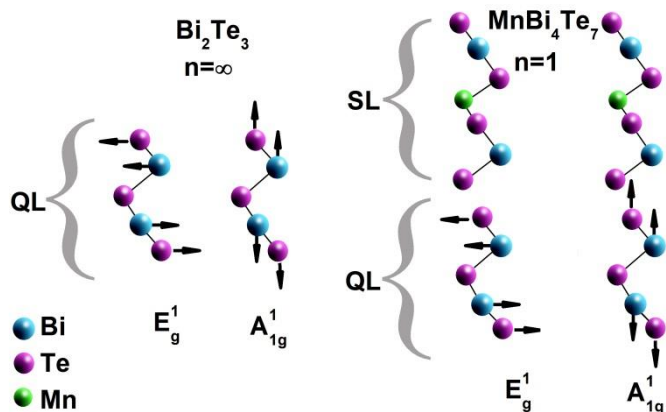


Рисунок 2.5.3. Слева: поля смещения низкочастотных Раман-активных мод E_g^1 и A_{1g}^1 Bi_2Te_3 ($n=\infty$). Справа: поля смещения E_g^1 и A_{1g}^1 Раман-активных мод MnBi_4Te_7 ($n = 1$), правый рисунок. Стрелками указано направление смещений, происходящих параллельно (горизонтальные стрелки) и перпендикулярно (вертикальные стрелки) к плоскости слоя для колебаний типа E_g^1 и A_{1g}^1 , соответственно.

Из вышеизложенного следует, что поля смещений низкочастотных мод решетки $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ с $n = 1$ (MnBi_4Te_7) имеют вид, показанный справа на рисунке 2.5.3., где поля смещений этих моды в Bi_2Te_3 также приведены слева для сравнения.

Высокочастотные противофазные вне плоскостные моды E_g^2 и A_{1g}^2 при $n > 0$, показанные на рисунке 2.5.2., трудно отнести к пятислойным пакетам, или семислойным пакетам либо к обоим пакетам одновременно. Частоты E_g^2 -мод MnBi_2Te_4 и остальных членов ряда соединений $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ идентичны, и моды неотличимы друг от друга. Мода A_{1g}^2 MnBi_2Te_4 уже не существует при $n > 0$, а наиболее близкой к моде A_{1g}^2 структур с $n > 0$ является мода A_{1g}^3 MnBi_2Te_4 (рисунок 2.5.2.). Хотя существует небольшая (2%) разница частот между модой A_{1g}^3 структуры с $n = 0$ и модой A_{1g}^2 структур с $n > 0$, изменение, этого недостаточно, чтобы отнести моду A_{1g}^2 к пятислойному пакету. Решающим в этом отношении (это касается и моды E_g^2) является тот факт, что участие пятислойного пакета в низкочастотных колебаниях диктует участие в высокочастотных колебаниях. Такое отнесение подтверждается ограниченным числом линий комбинационного рассеяния, наблюдаемыми для соединений $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ с $n > 0$.

Как видно из рисунка 2.5.4., по мере увеличения доли пятислойных пакетов в объеме рассеяния, доля семислойных пакетов уменьшается, достигая 14%. Однако даже этой небольшой доли (не говоря уже о 50% при $n = 1$) вполне достаточно для обнаружения Раман-активных мод семислойного пакета, если бы такие моды существовали и проявлялись, как в случае четного 1 семислойного MnBi_2Te_4 [25,55].

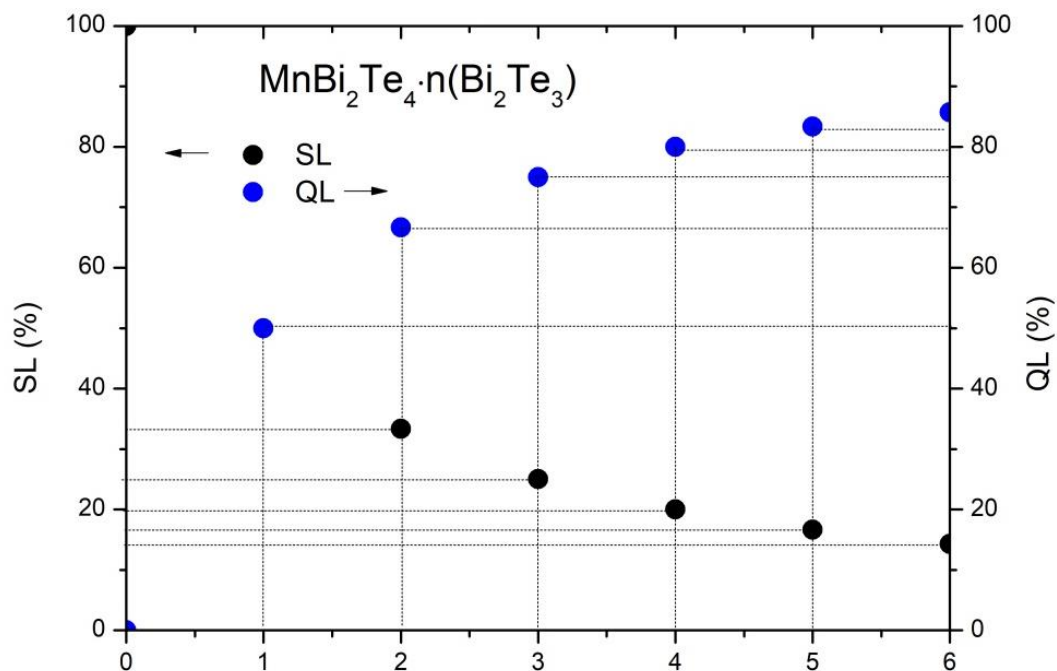


Рисунок 2.5.4. Процентное соотношение семислойного пакета (SL) (левая шкала, черные сплошные кружки) и пятислойного пакета (QL) (правая шкала, синие сплошные кружки) в $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$, принятых за $\frac{100\%}{n+1}$ и $\frac{100\%n}{n+1}$ для семислойных пакетов и пятислойных пакетов соответственно.

Таким образом, Раман-активная часть динамики решетки $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ с n в диапазоне $1 < n < \infty$ определяется динамикой решетки n пятислойных пакетов Bi_2Te_3 . Заметим, что это не слишком удивительно, поскольку такая динамика является предпосылкой предельного случая Bi_2Te_3 .

Спектры комбинационного рассеяния, ранее доступные только для систем с индексом $n < 4$, были получены для систем с $n = 4, 5$ и 6 .

Обнаружено существенное несоответствие между результатами анализа точечной симметрии и экспериментальными наблюдениями относительно количества колебательных мод, активных в комбинационном рассеянии $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ с индексом n в диапазоне $1 < n < \infty$. Это противоречие может быть снято, если динамика решетки $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ с заданным индексом n и n пятислойных пакетов Bi_2Te_3 будут подобны. Единственное различие между $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ и Bi_2Te_3 состоит в том, что в первом поле смещений каждой моды включает атомные смещения в пятислойном пакете и бесконечно малые атомные смещения в семислойном пакете, а во втором только атомные смещения в пятислойном пакете образуют решеточные моды.

Магнитные атомы Mn не участвуют в полях смещения мод, активных в комбинационном рассеянии, но дают вклад в ИК-активных модах. К сожалению, опубликованные инфракрасные исследования [17, 51, 52] были сосредоточены на связи между магнитным упорядочением и электронной структурой, а не на инфракрасных активных фонах, которые еще предстоит изучить для $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$.

2.6. Раман активные фононы в топологических изоляторах $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x\text{TeI}$ ($x=0.05$ и 0.1) с эффектом Рашбы.

Известно, что эффект Рашбы [19] раздвигает противоположные спин-поляризованные электронные состояния на импульс k_R в противоположных направлениях и вводит спиновое расщепление, индуцированное спин-орбитальным взаимодействием. Эффект Рашбы характеризуется энергией расщепленных состояний Рашбы E_R и параметром Рашбы $\alpha_R = 2E_R/k_R$. Последний определяет степень спинового расщепления.

Эффект Рашбы встречается в ряде нецентросимметричных системах, включая полупроводниковые гетероструктуры и квантовые ямы с нарушением симметрии, возникающим под действием внешних электрических полей или других возмущений [20,33,56,65,95].

Объемные двумерные полупроводники BiTeI [33,40] с гигантскими значениями параметров E_R и α_R , признаны полупроводниками с эффектом Рашба.

Спектры комбинационного рассеяния BiTeI ($x=0$), $\text{Bi}_{0.95}\text{Sb}_{0.05}\text{TeI}$ ($x=0.05$) и $\text{Bi}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}\text{TeI}$ ($x=0,1$) представлены на рисунке 2.6.1. Для BiTeI наблюдаются три интенсивных и один слабый пик комбинационного рассеяния при 92.9, 101, 148.6 и 124 cm^{-1} соответственно (верхний спектр) [4].

Фононы в центре зоны Бриллюэна в BiTeI представлены двумя дважды вырожденными E-модами и двумя A_1 -модами [74,77,89]. Эти моды активны как в комбинационном, так и в инфракрасном диапазоне из-за отсутствия центра инверсии в BiTeI .

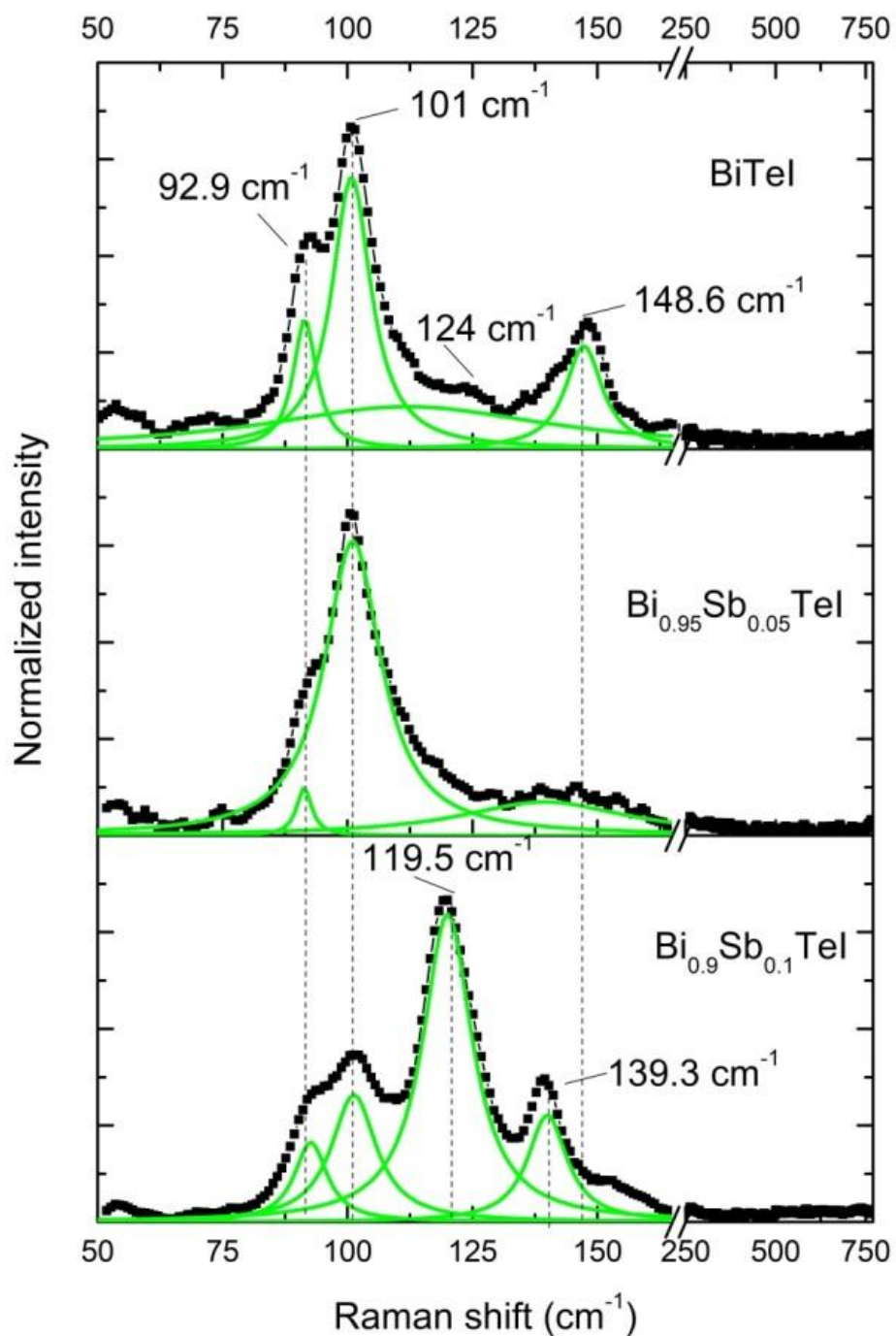


Рисунок 2.6.1. Нормализованные спектры комбинационного рассеяния вместе с результатами разложения на Гаусовы функции (зеленые линии).

Небольшая особенность около 124 см^{-1} (рисунок 2.6.1., верхний спектр) может быть связана с расщепленной LO-TO модой E-симметрии, но определяющей в нашем случае является эволюция обычно наблюдаемых интенсивных мод A_1 (92.9 см^{-1}), E (101 см^{-1}) и A_1 (148.6 см^{-1}) при изменении x . В то время как мода A_1 (148.6 см^{-1}) размыта в спектрах комбинационного рассеяния $\text{Bi}_{0.95}\text{Sb}_{0.05}\text{TeI}$ (рисунок 2.6.1., средний спектр) и почти не видна в спектре комбинационного рассеяния $\text{Bi}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}\text{TeI}$ (рисунок 2.6.1., нижний спектр), первые две моды сохраняются и не меняют своего положения ни после замены 5 % (рисунок 2.6.1., средний спектр), ни после замены 10 % (рисунок 2.6.1., нижний спектр) атомов Bi на атомы Sb, несмотря на то, что Sb на 42% легче Bi. Более подробный анализ такого поведения указанных выше мод дан в совсем недавней работе [3] вместе с рентгенограммами, подтверждающими сохранение гексагональной структуры BiTeI в $\text{Bi}_{0.95}\text{Sb}_{0.05}\text{TeI}$ и $\text{Bi}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}\text{TeI}$.

ГЛАВА III

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ФУНКЦИЯ ТИ В ОБЛАСТИ ЭНЕРГИЙ ФОТОНА 0.05-0.7 эВ

3.1. Эллипсометрические параметры ТИ со структурой тетрадимита в области энергий фотона в среднем и дальнем ИК.

Используя метод спектроскопической эллипсометрии описанный в пункте 2.4.3 и эллипсометр J.A. Woollam Vase-IR представленный в параграфе 2.5 с целью изучения оптических свойств топологических изоляторов, исследуемые в рамках данной диссертации, были измерены основные эллипсометрические параметры Ψ и Δ в диапазоне энергий фотона 0.05-0.7 эВ, для соединений Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 , $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ (где $n = 0, 2$) и $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_6\text{Te}_{10}$.

Основные эллипсометрические параметры Ψ и Δ в зависимости от угла падения электромагнитной волны для соединений Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 , $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ (где $n = 0, 2$) и $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_6\text{Te}_{10}$ представлены на рисунках 3.1.1. и 3.1.2. Экспериментальные данные обозначены круглыми символами, а сплошной линией обозначены результаты подгоночной оптимизации. Как видно, расчётные данные, полученные из построения оптической модели, хорошо согласуются с экспериментальными измерениями. Применённая оптическая модель состоит из границы воздух – полубесконечная подложка. Диэлектрическая функция воздуха известна, а диэлектрическая функция полубесконечной подложки была построена с применением осцилляторной функции Друде и Лоренца. Оптимизация для дисперсионной функции Друде (осциллятора) проводилась по известным измеренным концентрациям носителей заряда, полученные из эффекта Холла, неизвестными параметрами подгонки являлись подвижность и эффективная масса. Подвижность и эффективная масса были выбраны с близкими значениями к известным литературным данным. В случае осциллятора Лоренца подгоночными параметрами являлись амплитуда, уширение и энергия основного перехода. Выбор именно такой модели связан с тем, что на псевдо-диэлектрической

функции наблюдается вклад от свободных носителей, который описывается осциллятором Друде, а для учёта вклада межзонных переходов происходящий на краю поглощения для этих соединений использовался осциллятор Лоренца.

На рисунке 3.1.2. для образца MnBi_2Te_4 дано измерение только при одном угле (угол падения 45°), это связано с тем, что изучаемые образцы имели маленькую площадь контактной поверхности. Эллипсометрия в инфракрасном диапазоне спектра очень чувствительна к размерам, это связано с большим размером пробирующего пучка электромагнитной волны, который сложно сфокусировать в отличие для случая диапазона около видимого света. Направленный пучок света выходил за пределы поверхности образца, тем самым происходила потеря сигнала. Эта проблема имела место для других соединений гомологического ряда $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$. Тем не менее, результаты, полученные из измерения для MnBi_2Te_4 , достаточны для изучения.

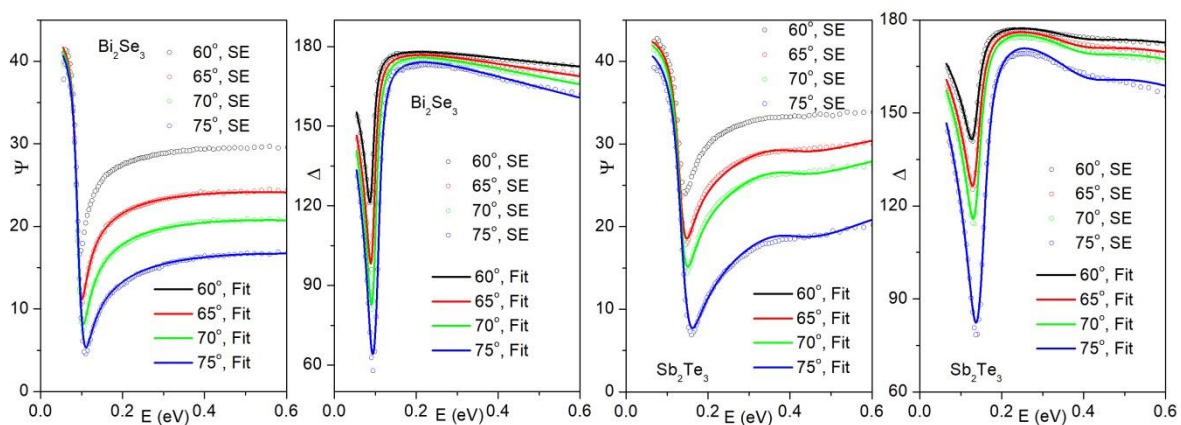


Рисунок 3.1.1. Основные эллипсометрические параметры Ψ и Δ в диапазоне энергий фотона 0.05-0.7 эВ, для соединений Bi_2Se_3 и Sb_2Te_3

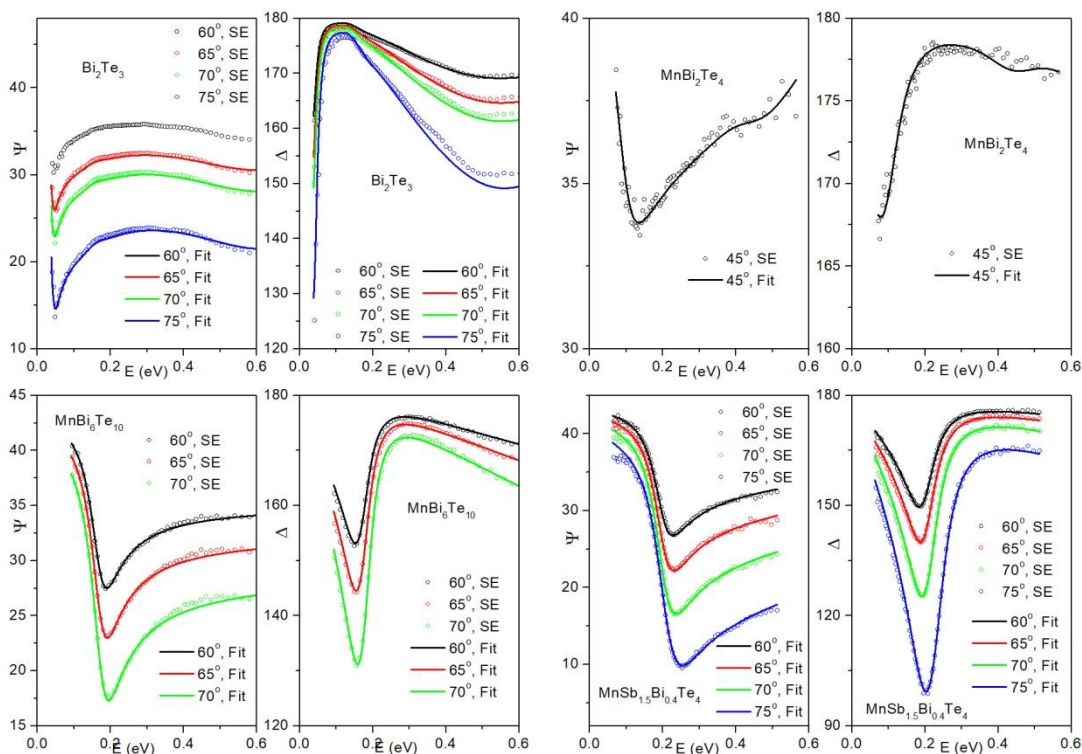


Рисунок 3.1.2. Основные эллипсометрические параметры Ψ и Δ в диапазоне энергий фотона 0.05-0.7 эВ, для соединений Bi_2Te_3 , $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ (где $n = 0, 2$) и $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_6\text{Te}_{10}$.

На рисунке 3.1.3 приведены графики экспериментальных (обозначены кружками) и расчётных (обозначены сплошной линией) эллипсометрических параметров Ψ и Δ для различных углов падения соединений $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x\text{TeI}$ ($x=0, 0.05$ и 0.1). Расчётные параметры определены из оптической модели с помощью осцилляторов Друде (вклад свободных носителей) и Лоренца (вклад межзонных переходов).

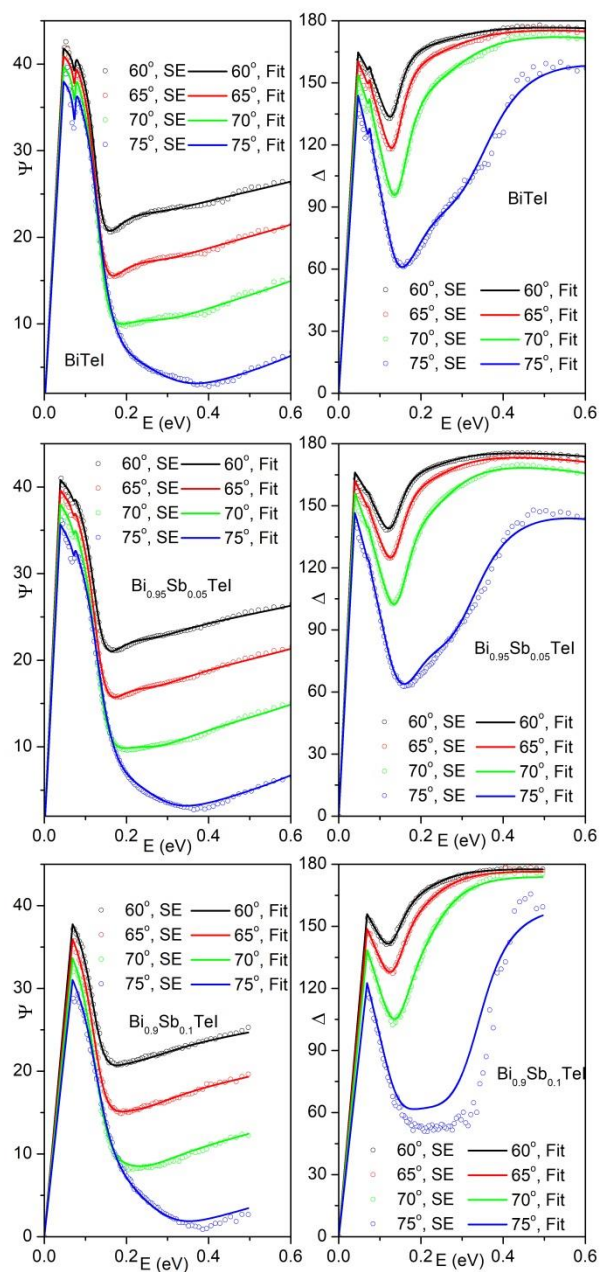


Рисунок 3.1.3. Основные эллипсометрические параметры Ψ и Δ в диапазоне энергий фотона 0.05-0.7 эВ, для соединений $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x\text{TeI}$ ($x=0, 0.05$ и 0.1)

3.2. Диэлектрическая функция топологических изоляторов и поглощение свободных носителей заряда.

3.2.1. Моделирование диэлектрической функции топологических изоляторов.

Падающая электромагнитная волна на поверхность границы раздела металл-диэлектрик способна возбудить коллективные колебания свободных носителей заряда или волны зарядовой плотности. В изучаемых топологических изоляторах падающая электромагнитная волна возбуждает соответствующий поляритон в средней инфракрасной области. Эти возбуждения классифицируются на объемными (ОПП) и поверхностными (ППП) плазмон-поляритонами [73].

Статистика Ферми-Дирака описывает распределение занятых и свободных энергетических состояний электронов в ферми-газе, то есть в системе, состоящей из множества свободных электронов в потенциале, создаваемом атомными ядрами. Свободные носители заряда, к которым относятся электрон и дырка являются фермионами, то есть частицами с полуцелым спином, а их статистическое поведение описывается статистикой Ферми-Дирака:

$$F(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-E_F}{k_B T}\right)+1} \quad (3.2.1)$$

В вырожденном полупроводнике каждый уровень энергии имеет много свободных электронов, которые могут находиться в этом уровне, так что электроны начинают заполнять уровни энергии от самых низких к самым высоким в соответствии с принципом Паули. Условием вырождения является следующее соотношение $\frac{E_F}{k_B T} > 10$, а случай удовлетворяющий условию $-4 < \frac{E_F}{k_B T} < 10$ относится к случаю с частично вырожденным электронным газом. А вот частицы в системе с $\frac{E_F}{k_B T} < -4$ описываются классическим распределением Больцмана, в такой системе электронный газ называется

невырожденным [99]. Структуры типа тетрадимит исследуемые в данной диссертации относятся к полупроводникам с частичным вырождением.

Интеграл Ферми-Дирака (или функция распределения Ферми-Дирака) для вырожденного полупроводника может быть записан следующим образом:

$$F_j(\eta) = \int_0^{\infty} \frac{x^j}{1+e^{x-\eta}} dx \quad (3.2.2)$$

где μ – химический потенциал (энергия Ферми), $\eta = \frac{\mu}{k_B T}$, k_B постоянная Больцмана. Все случаи интеграла Ферми-Дирака табулированы. В случае $j = \frac{1}{2}$ в $\eta > 1.25$ решение аппроксимируется в следующий вид $F_{\frac{1}{2}}(\eta) = \frac{4\eta^{\frac{3}{2}}}{3\pi^{\frac{1}{2}}} + \frac{\pi^{\frac{3}{2}}}{6\eta^{\frac{3}{2}}}$ с погрешностью в 1.5 %.

Интеграл Ферми-Дирака представляет собой сумму всех занятых уровней энергии в полупроводнике. В частично вырожденном полупроводнике, где некоторые уровни энергии имеют большое количество занятых состояний, интеграл Ферми имеет большое значение. Он используется для определения концентрации электронов в полупроводнике и других свойств, таких как проводимости и электропроводности.

Если полупроводник вырожден, то для числа носителей зарядов вычисляется через использование интеграла Ферми-Дирака, отсюда концентрация носителей заряда будет вычисляться с помощью выражения [43]:

$$N = \frac{4\pi(2m_{h/e}^* k_B T)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \times F_{\frac{1}{2}}(\eta) \quad (3.2.3)$$

В том случае если имеются две зоны $CB1$ и $CB2$ разницей в краях зоны Δ_{CB} , то для концентрации носителей заряда будем иметь [43]

$$N = N_{CB1} + N_{CB2} = \frac{4\pi(2m_{CB1}^* k_B T)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \times F_{\frac{1}{2}}(\eta) + \frac{4\pi(2m_{CB2}^* k_B T)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \times F_{\frac{1}{2}}\left(\eta - \frac{\Delta_{CB}}{k_B T}\right) \quad (3.2.4)$$

Узкозонные частично вырожденные полупроводники перспективны для применения в ИК плазмонике, так как имеют плазмонный резонанс в среднем ИК диапазоне. Этот эффект изучается в рамках данной работы.

3.2.2. Моделирование диэлектрической функции в Bi_2Se_3 и Sb_2Te_3 .

Ранее в литературе было показано, что частоты возбуждения поверхностного плазмонного резонанса в Bi_2Se_3 и Sb_2Te_3 приходятся на ИК область [9, 59], тем самым исследование Bi_2Se_3 и Sb_2Te_3 в качестве плазмонных материалов становится очень перспективным направлением. Плазменная частота зависит от концентрации свободных носителей заряда, эта зависимость описывается известной формулой [9,59,63,98]:

$$\omega_p = \sqrt{\frac{Ne^2}{m^* \epsilon_0 \epsilon_\infty}} \quad (3.2.5)$$

где N – концентрация носителей, e – заряд электрона, m^* – эффективная масса свободного носителя заряда, ϵ_0 – диэлектрическая постоянная вакуума и ϵ_∞ – высокочастотная диэлектрическая постоянная.

Таким образом, положение максимальной частоты поверхностного плазмонного резонанса (ППР) в широкой области ИК спектра можно сдвигать, меняя концентрацию носителей заряда, за счет изменения стехиометрии проводящих соединений.

Возбуждение поверхностных плазмон поляритонов (ППП) возможно при выполнении условия $k_x = k_{\text{SPP}}$ проекции волнового числа возбуждающей электромагнитной волны k_x и волнового числа ППП k_{SPP} . Волновое число возбуждающей электромагнитной волны всегда ниже волнового числа ППП k_{SPP} . Для этого применяется методы призмного ввода (схема Кретчман) или за счет дифракции на поверхности дифракционной решетки. Проекция волнового числа электромагнитной волны для случая схемы Кретчмана равна [57]

$$k_x = \frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon_a} \sin(\theta) \quad (3.2.6)$$

где ω – частота электромагнитной волны, ϵ_a – диэлектрическая постоянная призмы, c – скорость света и θ – угол падения волны.

Ранее публиковались работы по наблюдению плазмонов в данных соединениях и в других структурах типа тетрадимит [4,27,59], но о ППП и его

перспективе применения для ИК-плазмонных устройств, и исследования свойств плазмона в литературе нет. В данной работе это показано впервые.

Как указывалось, частота ППР зависит от концентрации и эффективной массы носителей заряда. Таким образом, с максимальным приближением с помощью этих данных оценены транспортные параметры оптическим способом, т.е. из эллипсометрических измерений.

Спектральная зависимость диэлектрической функции от энергии фотона связанная с наличием свободных носителей заряда описывается осциллятором Друде.

Концентрация носителей заряда полученная из эффекта Холла на Bi_2Se_3 и Sb_2Te_3 $n=2.9 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ и $p=4.5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$, соответственно. Значения концентрации носителей из эффекта Холла использовались для оптимизации подгонки. Так как для подгонки важно знание приближенных величин подгоночных параметров, для построения физически верной оптической модели изучаемых образцов.

На рисунке ниже (рисунок 3.2.1.) приведены графики диэлектрических функций, полученные из спектроэллипсометрического эксперимента (SE) и построенной модели (Fit).

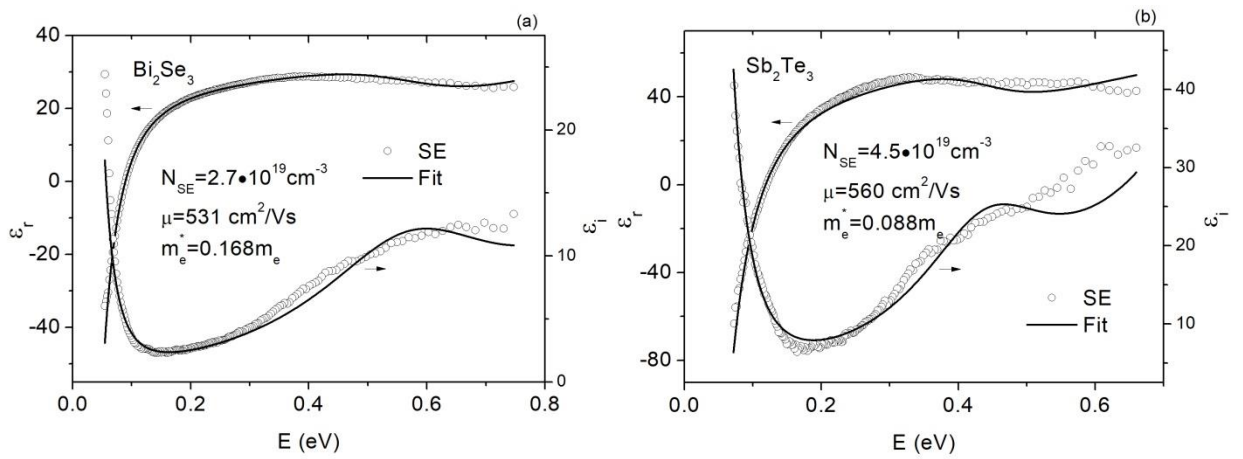


Рисунок 3.2.1. Зависимость действительной и мнимой компоненты диэлектрической функции от энергии фотона для Bi_2Se_3 (a) Sb_2Te_3 (b) в ИК области

Из результатов подгонки определены оптимальные концентрации носителей заряда и сравнены с данными эффекта Холла. Оказалось для Bi_2Se_3 $N_{SE} = 2.7 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ и $N_H = 2.9 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, а для Sb_2Te_3 $N_{SE} = 4.5 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ и $N_H = 4.5 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, соответственно. Видно хорошее согласие между полученными концентрациями для обоих соединений, среднее квадратичное отклонение имело значение менее 20.

Подтверждением правильности построенной модели на основе осциллятора Друде является пиковая форма функции потерь, график которой приведён на рисунке 3.2.2.

Положение этого пика соответствует резонансной частоте плазменных возбуждений носителей заряда или плазменной частоте. Таким образом, вклад в диэлектрическую в области ИК для исследуемого ТИ связан с внутризонными непрямыми переходами, то есть, возбуждением плазмы носителей заряда.

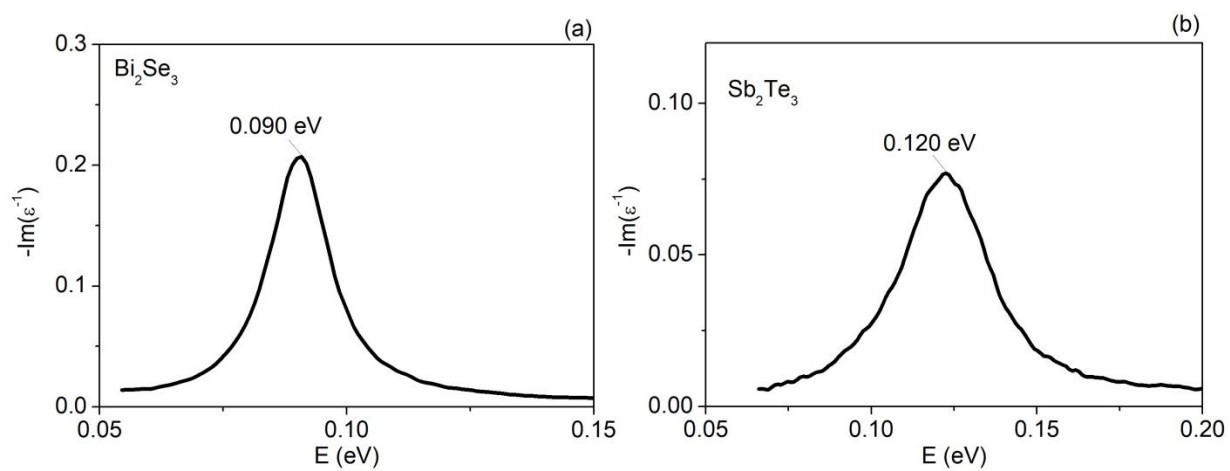


Рисунок 3.2.2. Зависимость от энергии фотона функция потерь для Bi_2Se_3 (a) Sb_2Te_3 (b) в ИК области

Полученные из подгонки эффективные массы равны $0.16m_e$ и $0.08m_e$ для Bi_2Se_3 и Sb_2Te_3 , соответственно. Имеется в виду инерционная масса квазисвободного носителя заряда в приближении эффективной массы. Эти данные полностью согласуются с приведенными в литературе [37] $0.16m_e$ для Bi_2Se_3 , а для Sb_2Te_3 значения разнятся и изучение природы этого отличия требует отдельного анализа. Механизм изменения эффективных масс ранее был изучен на примере кремния в [67]. Изменение происходит за счет вклада долин в зонной структуры с более тяжёлыми носителями, чей вклад в концентрацию носителей возрастает с ростом концентрации. Механизм может быть схожим с наблюдаемыми в Bi_2Se_3 и Sb_2Te_3 . Но для точного утверждения нужно дополнительное исследование образцов с разными концентрациями носителей.

3.2.3. Моделирование диэлектрической функции в Bi_2Te_3 .

На рисунке 3.2.3. приведены графики экспериментальной (SE) и рассчитанной из подгоночной оптимизации (Fit) действительной и мнимой частей диэлектрической функции в зависимости от энергии фотона для соединения Bi_2Te_3 в диапазоне энергий 0.05-0.7 эВ. Не смотря на отсутствие области с отрицательной диэлектрической функцией, которое точно бы указывало на наличие вклада свободных носителей заряда в диэлектрическую функцию, наблюдающийся уклон к нулю с уменьшением частот в действительной части диэлектрической функции и резкий рост поглощения ниже энергии 1.5 эВ, является достаточным основанием, чтобы предположить о вкладе именно свободных носителей заряда, в данном случае дырок, в диэлектрическую функцию.

Измерение эффекта Холла для Bi_2Te_3 позволило определить концентрацию носителей заряда $N_H = 1.2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, подгоночная оптимизация спектроэллипсометрических измерений дала крайне близкие значения $N_{SE} = 1.27 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Полученная из подгонки эффективная масса равна $0.170 m_e$.

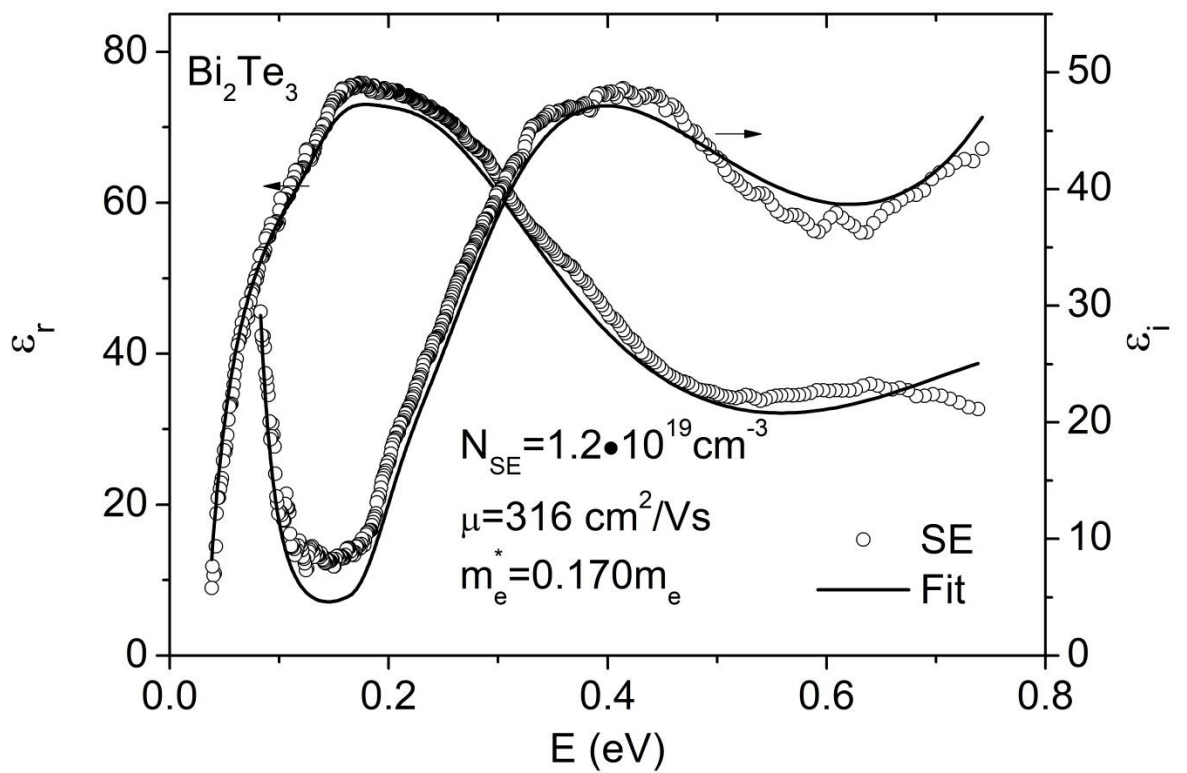


Рисунок 3.2.3. Зависимость действительной и мнимой компоненты диэлектрической функции от энергии фотона для Bi₂Te₃ в диапазоне энергий 0.05-0.7 эВ

Расчётные кривые очень хорошо повторяют экспериментальные данные (см. Рисунок 3.2.3.), а количественная характеристика релевантности выбранной модели, среднеквадратичное отклонение равно 9, что меньше 20. Но этого недостаточно, чтобы признать модель корректной. Нет пересечения диэлектрической функцией нуля, и она не становится отрицательной. Тем не менее, для Bi_2Te_3 диэлектрическая функция имеет резкий наклон к нулю, а её функция потерь на рисунке 3.2.4 резко возрастает.

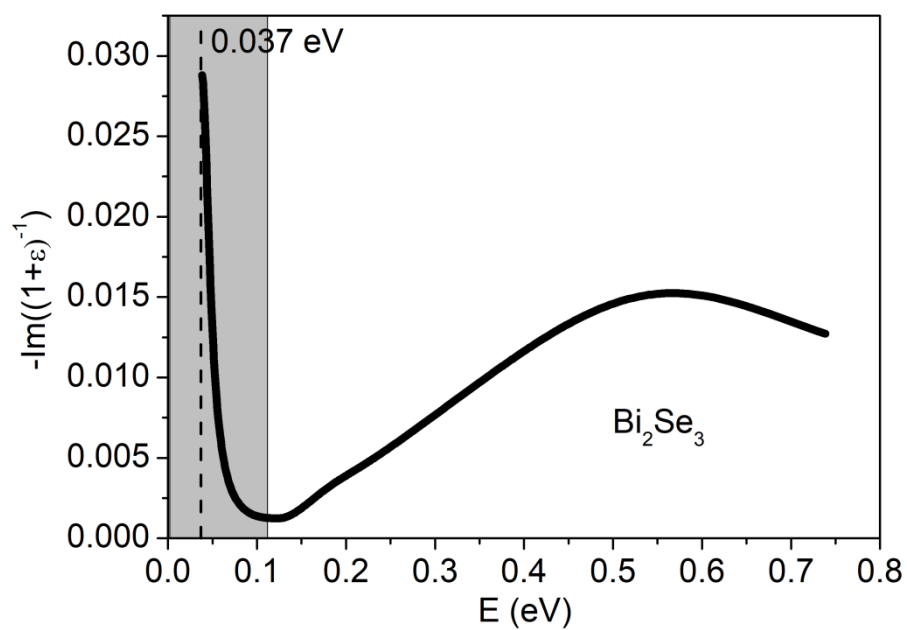


Рисунок 3.2.4. Зависимость от энергии фотона функция потерь для Bi_2Te_3 в ИК области

Возможности экспериментального оборудования оказались за необходим пределом определения плазменной частоты, но достаточны для соответствующего вывода о том, что вклад в этой области обусловлен внутризонными непрямыми переходами, то есть, возбуждением плазмы носителей заряда.

3.2.4. Моделирование диэлектрической функции в $MnBi_2Te_4$.

Исследование оптических свойств некоторых магнитных топологических изоляторов занимает существенное место в данной работе. Научный интерес к магнитным топологическим изоляторам значительно возрос после публикации международной коллаборации в которую также входит азербайджанская группа под руководством академика Назима Мамедова. В работе [69] впервые была теоретически и экспериментально продемонстрировано наличие топологических состояний в собственном магнитном топологическом изоляторе $MnBi_2Te_4$.

На рисунке 3.2.5. представлены экспериментальные и расчётные графики действительной и мнимой частей тензора диэлектрической функции магнитного топологического изолятора $MnBi_2Te_4$. $MnBi_2Te_4$ частично вырожденный полупроводник с электронной проводимостью. Построенная оптическая модель с использованием осцилляторов Друде и Лоренца позволила оптимизационным путем определить концентрацию носителей $N_{SE} = 3.5 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, которая соответствует такому же значению, как и полученному из эффекта Холла. Подвижность носителей при такой высокой концентрации соответственно маленькая и равна $\mu = 4.633 \text{ cm}^2/Vs$, а эффективная масса носителей заряда равная $2.488m_e$. Полученная величина эффективной массы слишком высокой не может не вызывать вопросы так как из расчётной зонной структуры эффективная масса на уровне соответствующий дну зоны проводимости в точке высокой симметрии Z равна $0.12m_e$. Данный момент будет разобран отдельно в данной диссертации.

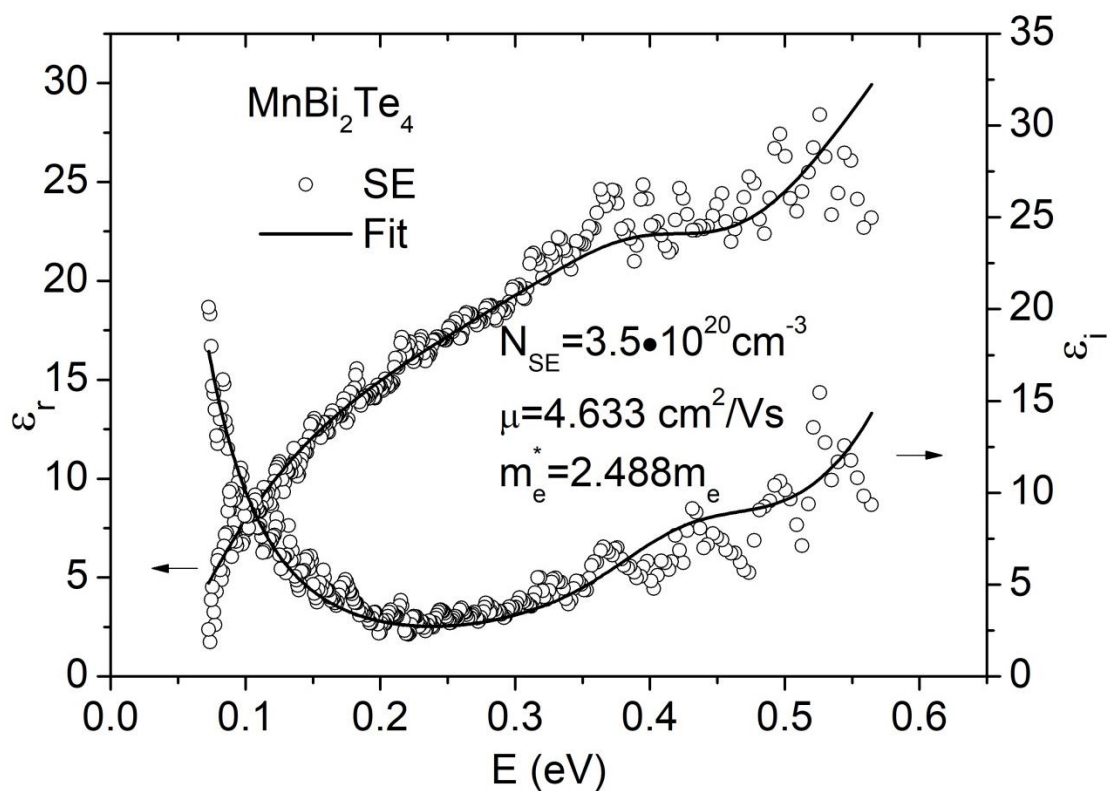


Рисунок 3.2.5. Зависимость действительной и мнимой компоненты диэлектрической функции от энергии фотона для MnBi_2Te_4 в ИК области

Диэлектрическая функция для MnBi_2Te_4 также не пересекает нуль. При этом, функция потерь на рисунке 3.2.6 имеет пик. Совокупность этих данных достаточно для подтверждения вклада внутризонными непрямыми переходами.

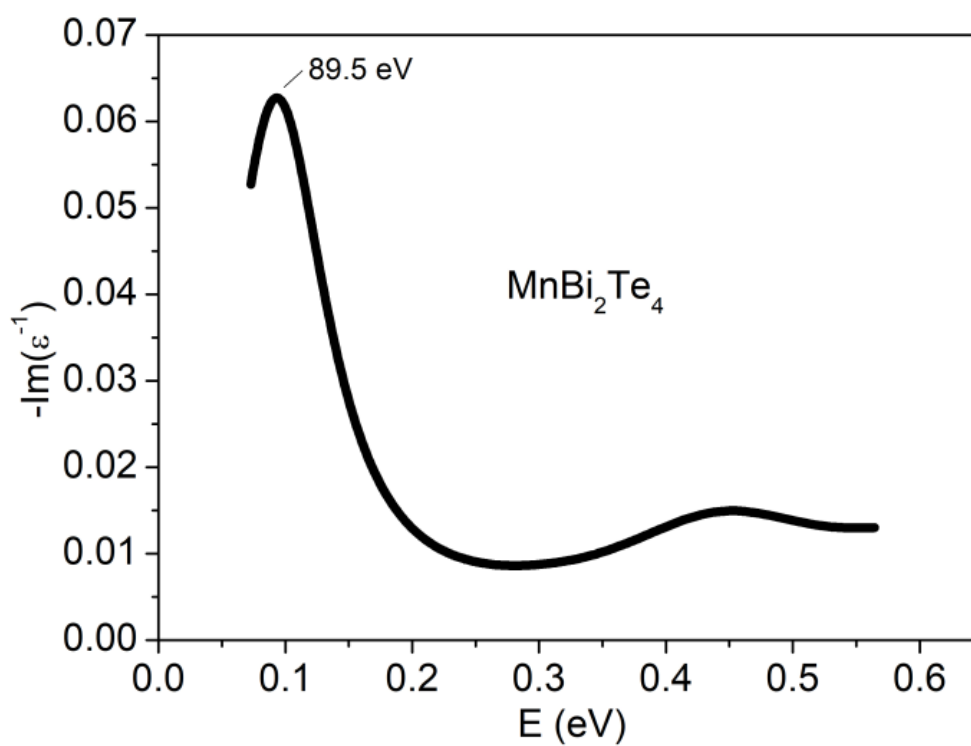


Рисунок 3.2.6. Зависимость от энергии фотона функция потерь для MnBi_2Te_4 в ИК области

3.2.5. Моделирование диэлектрической функции в $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$.

На рисунке 3.2.7 приведены компоненты диэлектрической функции для $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$. Помимо экспериментальных данных (полые кружочки) приведены результаты подгонки этих компонент (сплошная линия). Исследуемый образец $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ является частично вырожденным полупроводником с электронной проводимостью. Высокая концентрация носителей заряда в полученных образцах позволила сделать наблюдаемым в исследуемой ИК области плазменное возбуждение благодаря существенному вкладу отражения на свободных носителях заряда. Моделирование оптических свойств с использованием осциллятора Друде и Лоренца позволило оптимизационным путем извлечь концентрацию носителей $N_{SE} = 1.04 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, подвижность носителей $\mu = 136 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ и эффективную массу носителей равная $0.111m_e$.

Вклад в спектр диэлектрической функции свободных носителях заряда и межзонными переходами приблизительно в 0.25 eV.

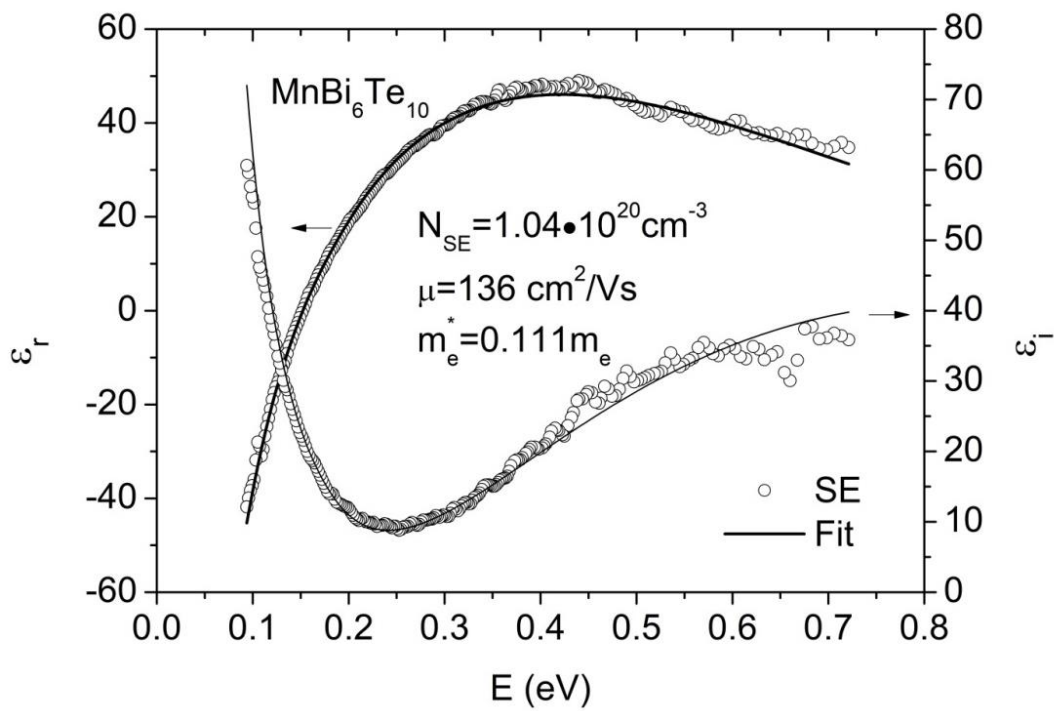


Рисунок 3.2.7. Зависимость действительной и мнимой компоненты диэлектрической функции от энергии фотона для $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ в ИК области

Функция потерь (рисунок 3.2.8) для $\text{MnV}_6\text{Te}_{10}$ также имеет пик в этой области, что является подтверждением правильного подхода и вклада в диэлектрическую функцию возбуждением плазмы свободных носителей.

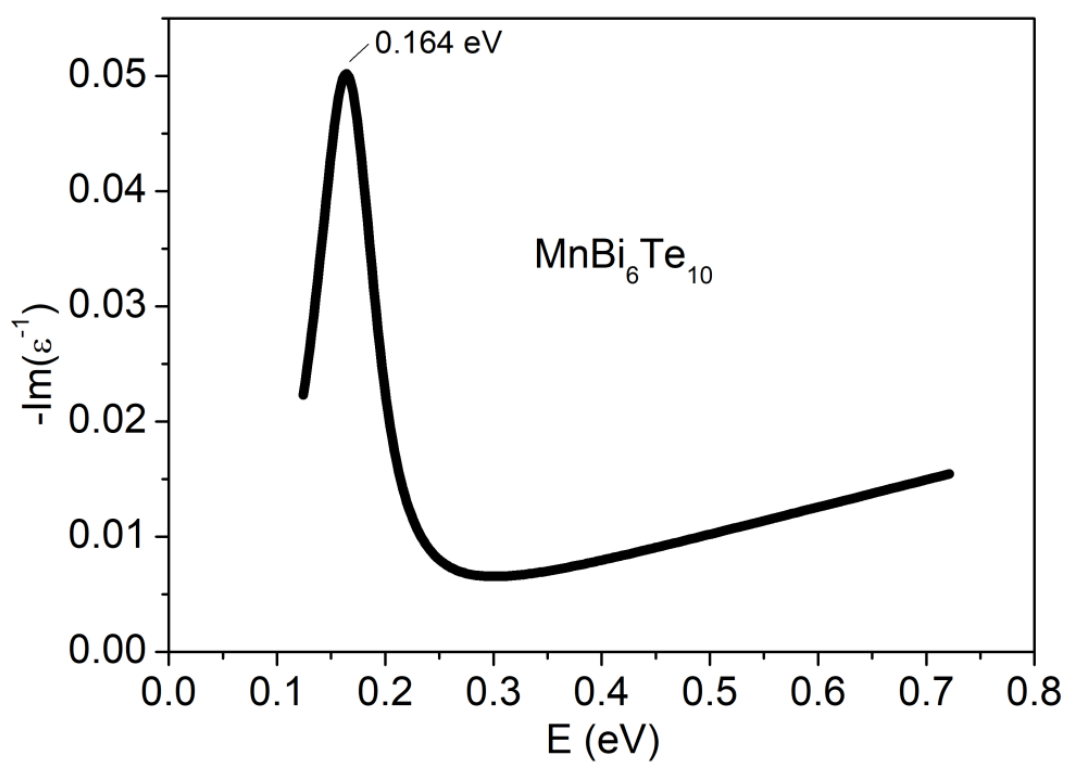


Рисунок 3.2.8. Зависимость от энергии фотона функция потерь для $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ в ИК области

3.2.6. Моделирование диэлектрической функции в $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_{0.05}\text{Te}_4$.

Образец $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_6\text{Te}_{10}$ с дырочной проводимостью демонстрирует аналогичное поведение в инфракрасном спектре, как и большинство соединений со структурой тетрадимита. Из построенной оптической модели (рисунок 3.2.9.), с применением осцилляторов, удалось оценить концентрацию носителей $N_{SE} = 4.5 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ и подвижность носителей заряда $\mu = 10 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, а эффективная масса носителей заряда равная $0.368m_e$.

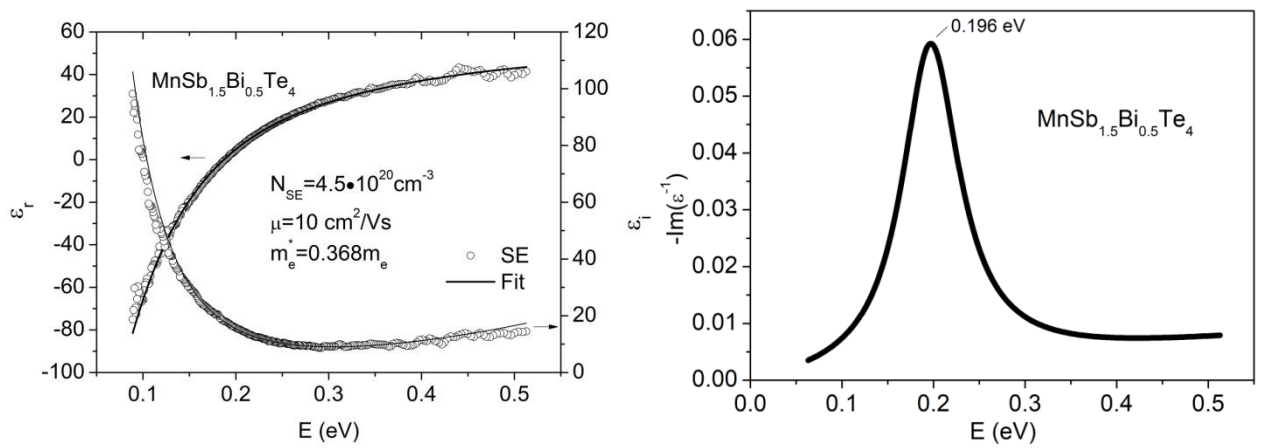


Рисунок 3.2.9. Зависимость действительной и мнимой компоненты диэлектрической функции (слева) и функции потерь (справа) от энергии фотона для $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_{0.5}\text{Te}_4$ в инфракрасной области

Величина эффективной массы ($0.368m_e$), отличается полученная из спектроскопической эллипсометрии от расчётных, равные $m^* = 0.278m_e$ (для лёгких дырок, VB1) и $m^* = 0.405m_e$ (для тяжёлых дырок, VB2). $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_6\text{Te}_{10}$ вырожденный полупроводник с дырочной проводимостью, это означает, что уровень Ферми для этого твёрдого соединения находится внутри валентной зоны (рисунок 3.2.10.). Применяя формулы $k_F = \sqrt[3]{3\pi^2N}$ и $E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m_e^*}$, можем оценить низкотемпературный уровень Ферми равный $E_F = 0.126$ эВ, это позволяет приблизительно оценить действительное положение уровня Ферми. Главное оценить приблизительно положение уровня Ферми относительно уровня с тяжёлыми и лёгкими дырками. Точное определение энергии Ферми, в данном случае с применением этого подхода является не совсем корректным, так как этот подход применим для практически вырожденного металлизированного вырожденного состояния. Исследуемый твёрдый раствор $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_6\text{Te}_{10}$ является частично вырожденным. Но этого достаточно чтобы быть уверенным, что оба уровня дают вклад в общую концентрацию носителей заряда, в данном случае дырок.

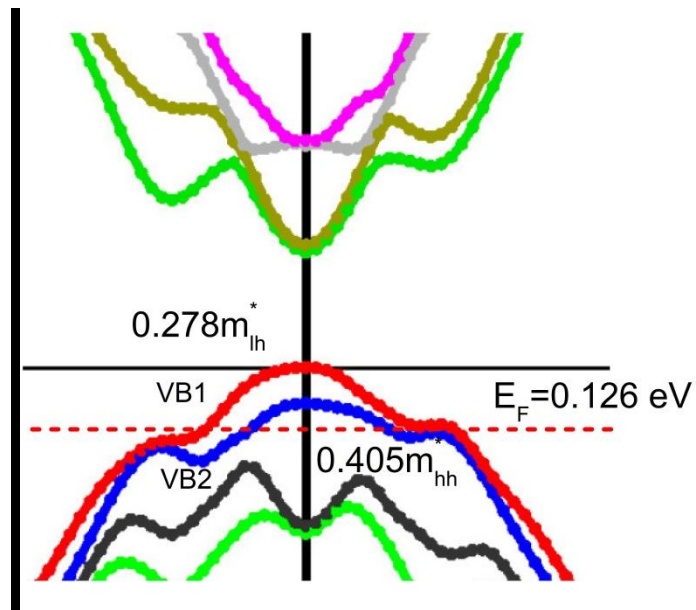


Рисунок 3.2.10. Зонная структура твердого раствора $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_6\text{Te}_{10}$ вблизи Γ (черная вертикальная линия). $VB1$ отмечен красным цветом, $VB2$ отмечен синим цветом.

Применив соотношение $N_{SE}m^* = N_{SE}^{VB1}m^{1*} + N_{SE}^{VB2}m^{2*}$, удалось определить вклад каждого уровня в общую концентрацию $N_{SE}^{VB1} = 1.28 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ и $N_{SE}^{VB2} = 3.22 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$. Таким образом, несмотря на то, что уровень лёгких дырок $VB1$ находится выше, чем уровня тяжёлых дырок $VB2$, вклад $VB2$ в общую концентрацию носителей заряда больше, что не удивительно, так как плотность состояний $VB2$ больше.

3.2.7. Моделирование диэлектрической функции в $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x\text{TeI}$.

Поглощение на свободных носителях (внутризонные переходы) проявляется отрицательными значениями ϵ_1 (рисунок 3.2.11.) и возрастающими значениями ϵ_2 с уменьшением энергии фотонов (рисунок. 3.2.11.). При помощи построенной оптической модели с использованием осциллятора Друде и Лоренца оптимизационным путём определены концентрация носителей заряда, подвижность и эффективная масса соединений $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x\text{TeI}$ с $x=0, 0.05$ и 0.1 . На рисунке 3.2.11. сплошной линией обозначена модельная кривая (Fit). Известно, что край плазмы свободных носителей (точка пересечения ϵ_1 через нуль) соответствует экранированной плазменной частоте ω_p^{scr} [72].

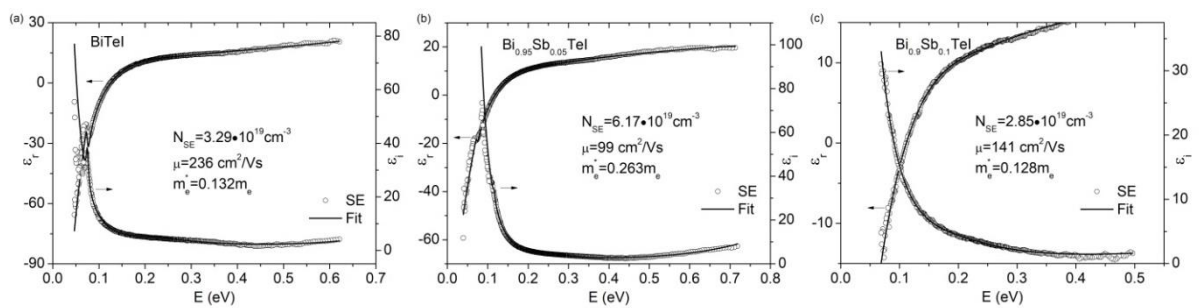


Рисунок 3.2.11. Зависимость действительной и мнимой компоненты диэлектрической функции от энергии фотона для $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x\text{TeI}$ ($x=0, 0.05$ и 0.1) в ИК области

В таблице 3.2.1. ω_p^{scr} соответствует точке пересечения нуля графиком ϵ_1 , приведённой на рисунке 3.2.11. для каждого соединения, а значение ω_p определяется выражением

$$\omega_p = \sqrt{\frac{Ne^2}{m^* \epsilon_0}} \quad (3.2.7)$$

Величина ϵ_∞ получена из соотношения

$$\epsilon_\infty = \left(\frac{\omega_p}{\omega_p^{scr}} \right)^2 \quad (3.2.8)$$

Для удобства в исследованных образцах BiTeI , $\text{Bi}_{0.95}\text{Sb}_{0.05}\text{TeI}$ и $\text{Bi}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}\text{TeI}$, концентрация носителей заряда, полученная из эффекта Холла, а также концентрация, полученная путем варьирования N в осцилляторе Друде около значения концентрации Холла, чтобы получить наилучшее соответствие эллипсометрическим параметрам Ψ и Δ , эффективная масса электрона, подвижность электрона, плазменная частота, экранированная плазменная частота и высокочастотная диэлектрическая проницаемость приведены в таблице 3.2.1.

Таблица 3.2.1. Измеренная концентрация Холла (N_H), концентрация (N_{Drude}), полученная путем изменения N в уравнении. (2) вокруг N_H , чтобы получить наилучшее соответствие эллипсометрическим параметрам, эффективной массе электрона (m^*), подвижности электронов (μ), плазменной частоте (ω_p), экранированной плазменной частоте (ω_p^{scr}) и высокочастотной диэлектрической проницаемости (ϵ_∞) для исследованных образцов BiTeI, Bi_{0.95}Sb_{0.05}TeI и Bi_{0.9}Sb_{0.1}TeI. Здесь m_e обозначает массу свободного электрона.

Соединение	N_H (cm ⁻³)	N_{Drude} (cm ⁻³)	m^*	μ (cm ² /(Vs))	ω_p (cm ⁻¹)	ω_p^{scr} (cm ⁻¹)	ϵ_∞
BiTeI	3.3 × 10 ¹⁹	3.29 × 10 ¹⁹	0.132m _e	285	4754	992	23
Bi _{0.95} Sb _{0.05} TeI	6.25 × 10 ¹⁹	6.17 × 10 ¹⁹	0.263m _e	99	4612	975	22
Bi _{0.9} Sb _{0.1} TeI	2.85 × 10 ¹⁹	2.85 × 10 ¹⁹	0.128m _e	141	4493	895	25

Полученные подвижности находятся в пределах значений, указанных для BiTeI [91]. Полученные значения эффективной массы электрона для BiTeI ($0.132m_e$) и $\text{Bi}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}\text{TeI}$ ($0.128m_e$) очень близки к значению $m^* = 0.1489m_e$ [30] для двумерного спин-орбитально-связанного электронного газа Рашбы, погруженного в среду с диэлектрической проницаемостью $\epsilon_\infty \sim 19$ объемного BiTeI. В то же время извлечённая эффективная масса электрона, полученная для $\text{Bi}_{0.95}\text{Sb}_{0.05}\text{TeI}$, примерно вдвое больше эффективной массы двух других соединений.

3.2.7. Сравнение транспортных параметров полученными из эффектов Холла и спектроскопической эллипсометрии.

Концентрация носителей заряда, полученная из эффекта Холла по сравнению с параметрами, полученными из оптимизации оптической модели с применением осциллятора Друде приведена в таблице 3.2.2. Для вычисления удельного сопротивления из эффекта Холла так и для эллипсометрических данных использовалось известное соотношение:

$$\rho = \frac{1}{eN\mu} \quad (3.2.9)$$

Спектроскопическая эллипсометрия даёт хорошее согласие с электрическими измерениями. Эллипсометрия является бесконтактным методом исследования, что является преимуществом и делает полученные результаты более релевантными.

Таблица 3.2.2. Сравнение величин транспортных параметров полученные из измерения эффекта Холла и оптимизацией осциллятора Друде некоторых образцов со структурой тетрадимит

Структура	ρ_H	ρ_{Drude}	N_H (cm^{-3})	N_{Drude} (cm^{-3})	m_e^*	μ_H (cm^2/Vs)	μ_{Drude} (cm^2/Vs)
Bi_2Se_3 (n-type)	0.00038	0.00062	2.2×10^{19}	2.2×10^{19}	0.15	740	540
Bi_2Se_3 (n-type)	0.00040	0.00049	2.5×10^{19}	2.5×10^{19}	0.16	575	513
Bi_2Te_3 (p-type)	0.0016	0.00162	1.2×10^{19}	1.27×10^{19}	0.162	316	316
Sb_2Te_3 (p-type)	0.0002	0.00026	8.1×10^{19}	8.89×10^{19}	0.152	347	271
Sb_2Te_3 (p-type)	0.00012	0.00025	1.2×10^{20}	1.19×10^{20}	0.189	375	213
MnBi_2Te_4 (n-type)	-	0.00385	3.5×10^{20}	3.5×10^{20}	2.488	-	4.633
$\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ (n-type)	0.0010 (4.6K)	0.00044	1.2×10^{18} (4.6K)	1.04×10^{20}	0.111	4385 (4.6K)	136
$\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_6\text{Te}_{10}$	-	-	1.7×10^{20} (4.6K)	4.5×10^{20}	0.368	60 (4.6K)	40

3.3. Аномальная температурная зависимость экранированной плазменной частоты в MnBi_2Te_4

С помощью инфракрасной спектроскопии отражения исследованы объемные электронные свойства топологического антиферромагнетика MnBi_2Te_4 с температурой Нееля $T_N \approx 25 \text{ K}$. При помощи вычисленной зонной структуры предопределены внутризонные и межзонные возбуждения и оценена ширина запрещенной зоны $E_g \approx 0.17 \text{ эВ}$. Также получены доказательства существования вклада двух уровней в зоне проводимости с легкими и тяжелыми носителями заряда. Мультизонный отклик свободных носителей приводит к необычно сильному увеличению суммарной плазменной частоты ω_p ниже 300 К. Перестройка зоны проводимости ниже T_N приводит к дополнительному увеличению ω_p и расщеплению перехода между двумя зонами проводимости примерно на 54 мэВ. Таким образом, в рамках данного исследования обнаружен сложный и сильно зависящий от температуры многозонный низкоэнергетический отклик [17].

Эта информация о мультизонной природе свободных носителей и их низкоэнергетических возбуждений является первым шагом к пониманию плазмонных свойств в объеме, а также поверхностных состояний и их возможного приложения. Этого требует задача по уменьшению концентрации дефектов и, следовательно, легирования n-типа так, чтобы применялась более простая однозонная модель.

MnBi_2Te_4 демонстрирует металлическое сопротивление в плоскости с особенностью около $T_N \approx 25 \text{ K}$ (рисунок 3.3.1. (a)). Отрицательное удельное сопротивление Холла ρ_{xy} соединения MnBi_2Te_4 (рисунок 3.3.1. (b)) указывает на электронно-подобные носители с концентрацией $n = 1.7 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$, что согласуется с большинством предыдущих исследований [26,54,92].

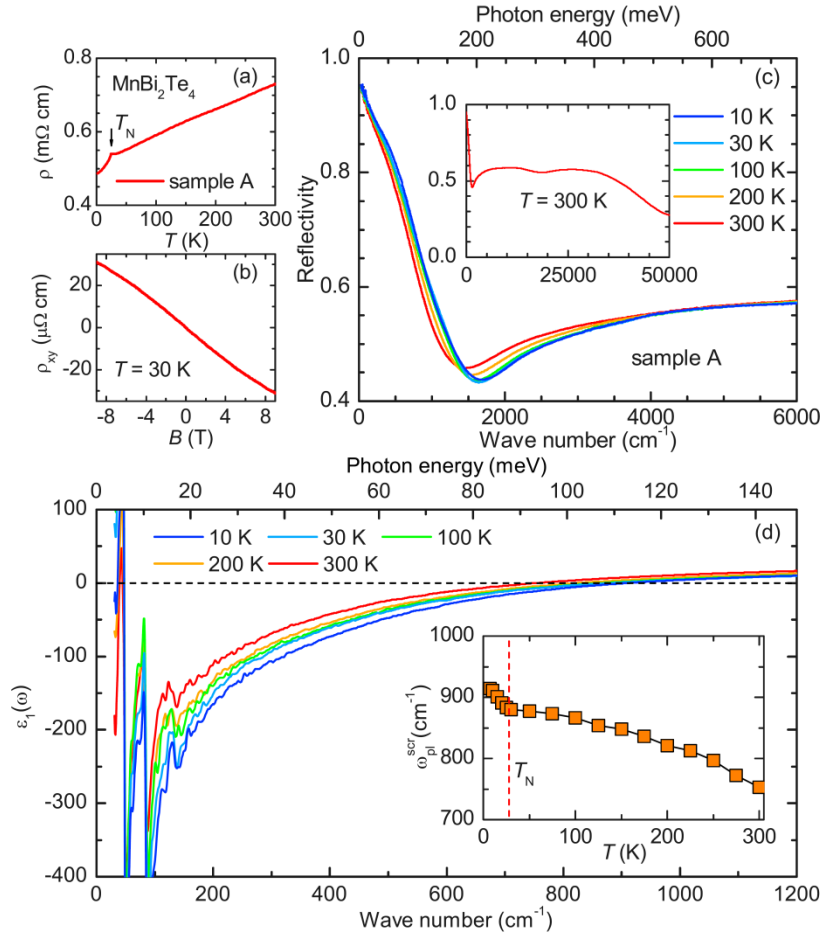


Рисунок 3.3.1. (а) температурная зависимость сопротивления соединения MnBi_2Te_4 . Стрелкой отмечен антиферромагнитный переход при $T_N \approx 25\text{K}$. (б) Холловское сопротивление ρ_{xy} соединения MnBi_2Te_4 при 30K . (в) температурная зависимость коэффициента отражения в инфракрасной области. Вставка: спектр от 30 cm^{-1} до $50\,000\text{ cm}^{-1}$ при 300K . (г) Т-зависимость действительной части диэлектрической проницаемости $\epsilon_1(\omega)$. Вставка: Скрининг плазменная частота, полученная при $\epsilon_1(\omega_p^{scr}) = 0$.

Рисунок 3.3.1. (с) показывает зависимость от температуры (T) коэффициента отражения $R(\omega)$ в ИК области спектра. На вставке выведен коэффициент отражение при 300К для широкого диапазона измерений от 30 см^{-1} до $50\,000 \text{ см}^{-1}$. Около 1500 см^{-1} наблюдается резкий подъем $R(\omega)$ к единице, что характерно для края плазмы из-за свободных носителей заряда. По мере уменьшения температуры этот край плазмы смещается к более высокой частоте, указывая на увеличение плотности свободных носителей n либо уменьшение эффективной массы m^* .

На рисунке 3.3.1. (d) представлена зависимость действительной части диэлектрической проницаемости $\epsilon_1(\omega)$ от температуры. Резкие особенности на $47, 84$ и 133 см^{-1} представляют собой инфракрасно-активные фононы, которые в рамках данной работы не изучались. Горизонтальной пунктирной линией показано пересечение нуля $\epsilon_1(\omega)$, отмечающее скрининговую плазменную частоту ω_p^{scr} $\omega_p^{scr} = \frac{\omega_p}{\epsilon_\infty}$, где ϵ_∞ — высокочастотная диэлектрическая проницаемость, а ω_p — плазменная частота свободных носителей заряда. На вставке к рисунку представлена зависимость ω_p^{scr} от температуры, которая показывает необычно большое увеличение примерно с 750 см^{-1} при 300К и до 880 см^{-1} при 30К. Также наблюдается внезапное дополнительное увеличение ниже T_N примерно до 910 см^{-1} при 10К, что дает первое спектроскопическое указание на то, что антиферромагнитная фаза оказывает заметное влияние на электронные свойства MnVi_2Te_4 .

Расчеты зонной структуры (Рисунок 3.3.2.) (подробности описаны в [3]) в антиферромагнитной фазе дают два расщеплённых уровня легкой электронной проводимости (с эффективными массами электронов 0.09 и $0.15m_e$ и приведённое значение $0.12m_e$), расщепление приблизительно равно 80 мэВ . Существует также третий уровень тяжелых электронов с эффективной массой около $3m_e$. Дырочная масса валентной зоны составляет $0.28m_e$.

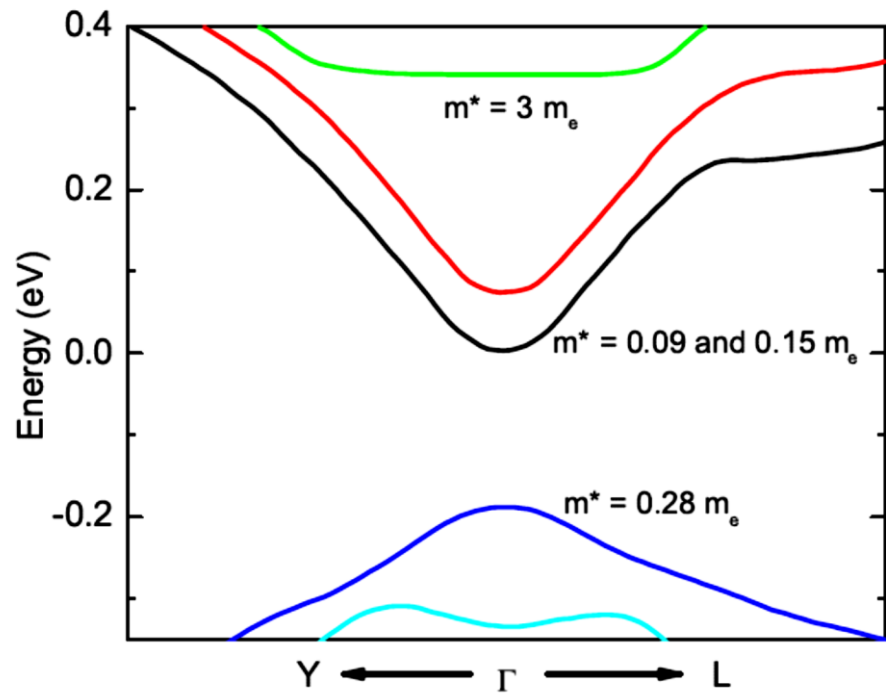


Рисунок 3.3.2. Схематическая демонстрация расчетной объемной зонной структуры MnBi₂Te₄ вдоль ΓY и ΓL в АФМ-фазе

Эффективные массы электронов и дырок были оценены путем подгонки параболы к расчетной дисперсии электронных зон вокруг точки Γ вдоль направлений Γ - Y и Γ - L зоны Бриллюэна для $MnVi_2Te_4$. Обратите внимание, что направление Γ - Y лежит точно в плоскости слоя. Другими словами, полосы, участвующие в экспериментально наблюдаемых межзонных или внутризонных оптических переходах, поляризованные $\mathbf{E} \perp \mathbf{C}$, где \mathbf{E} — электрический вектор падающего света, а \mathbf{C} — оптическая ось, перпендикулярная плоскости слоя, принадлежат направлению Γ - Y [41,42].

Необходимо отметить, что для большинства частично вырожденных легированных узкозонных полупроводников ω_p имеет гораздо более слабую зависимость от температуры и обычно уменьшается при охлаждении из-за вымораживания носителей заряда. Интересно, что другим редким исключением является Vi_2Te_3 , для которого ω_p^2 демонстрирует столь же сильное увеличение в сторону низких температур. В то время как образцы, изученные в работе [86] были дырочно-легированными, по аналогии с $MnVi_2Te_4$ они также могут иметь легкие и тяжелые дырки.

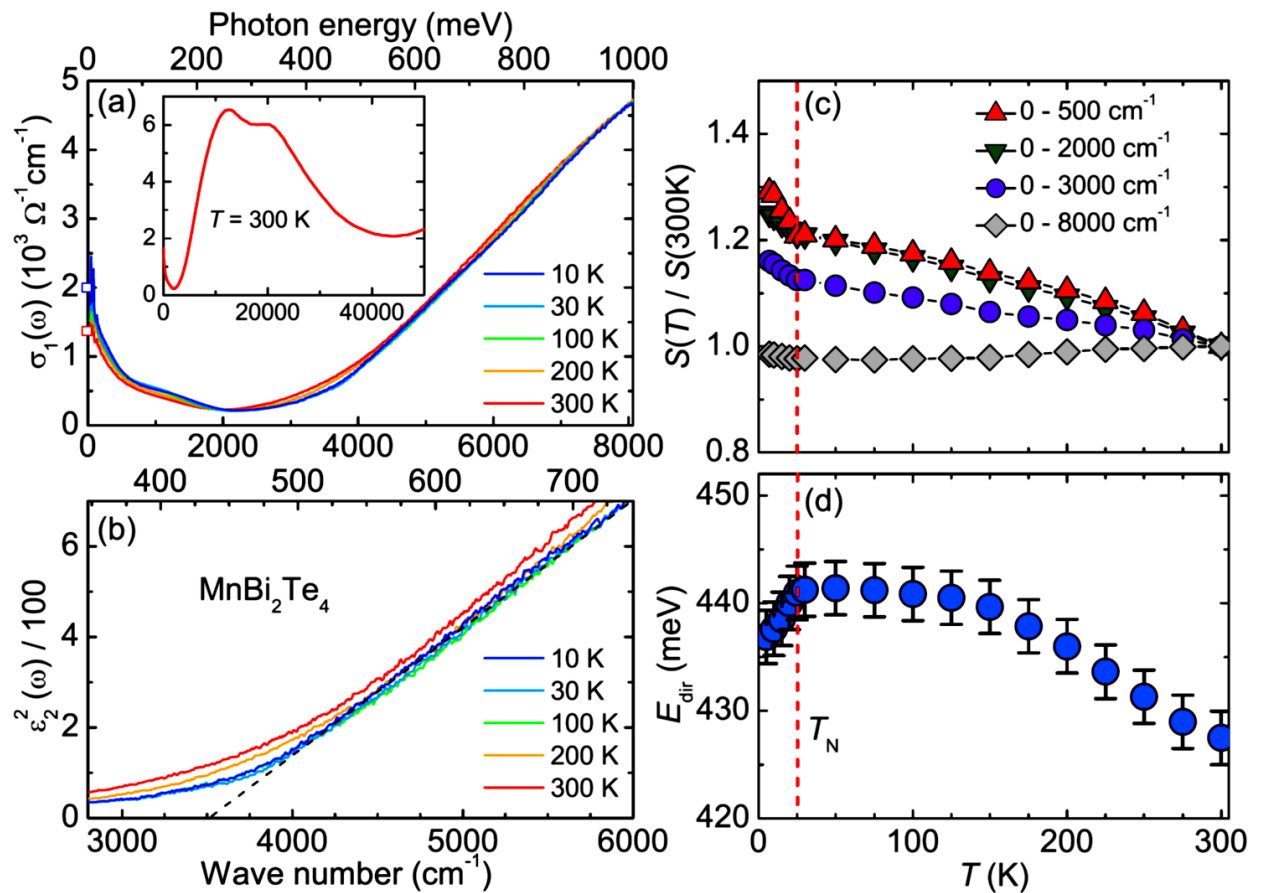


Рисунок 3.3.3. (a) Температурная зависимость оптической проводимости MnBi_2Te_4 . Символы на оси y обозначают σ_{DC} при 10 и 300 К из транспортных данных из рисунка 3.3.3. (a). Вставка: Спектр в широком диапазоне частот при 300 К. (b) температурная зависимость спектра $\epsilon_2^2(\omega)$. Пунктирная линия показывает линейную экстраполяцию в сторону пересечения в нуле $\epsilon_2^2(\omega)$ для получения начала прямых межзонных переходов E_{dir} . (c) температурная зависимость спектральной плотности для различных частот отсечки. (d) температурная зависимость E_{dir} .

На рисунке 3.3.3.(а) отображается температурная зависимость действительной части оптической проводимости $\sigma_1(\omega)$ от 30 до 8000 см^{-1} . На вставке представлен спектр при 300К в широкой области спектра, и которого видно преобладание двух межзонных переходов с полосами около 12 500 и 20 000 см^{-1} , согласуется с работой по ссылке [41]. Оптический отклик ниже 8000 см^{-1} включает в себя осциллятор Друде, простирающийся до 2000 см^{-1} , который выражено выделяется на фоне начала сильных межзонных переходов выше 3000 см^{-1} . Функция Друде растет при охлаждении, что согласуется с увеличением ω_p^{scr} на рисунке 3.3.1. (d). Данные проводимости на постоянном токе при 10 и 300 К на рисунке 3.3.1. (а) (квадратики на оси ординат) согласуются с экстраполяцией $\sigma_1(\omega)$ при нулевой частоте. Ширина пика Друде около 500 см^{-1} и почти не зависит от температуры и намного больше, чем, например, в Bi_2Te_3 [29]. Таким образом, в рассеянии преобладают эффекты переупорядочивания, например, из-за дефектов замещения Mn-Bi [94]. При линейной экстраполяции $\varepsilon_2(\omega)$, как показано на рисунке 3.3.1.(b). Он увеличивается при приближении к низким температурам, но резко уменьшается ниже T_N (см. рисунок 3.3.3. (d)).

Спектральные изменения были дополнительно проанализированы путем расчета эволюции спектральной плотности, $S(\omega_c) = \int_0^{\omega_c} \sigma_1(\omega) d\omega$, для различных частот отсечки ω_c . На рисунке 3.3.3.(с) показана зависимость отношения $S(\omega_c, T)/S(\omega_c, T = 300 \text{ K})$ от температуры T при репрезентативных отсечках. При $\omega_c=500$ и 2000 см^{-1} , когда преобладает отклик на свободных носителях заряда, спектральная плотность увеличивается при уменьшении температуры и демонстрирует дополнительный рост ниже T_N , что согласуется с тенденцией ω_p^{scr} на рисунке 3.3.1.(d). При более высоких значениях частоты отсечки это увеличение становится менее выраженным, пока при частоте $\omega_c= 8000 \text{ см}^{-1}$ (около 1 эВ) спектральная плотность не становится почти постоянной величиной. Это подтверждает, что

перераспределение спектральной плотности ограничивается энергиями ниже 1 эВ.

Моделирование спектроэллипсометрических измерений моделью Друде, дало значение концентрацию носителей заряда $N_{Drude} = 3.5 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ и эффективной массы $m^* = 2.488m_e$. Эффективная масса отличается от ожидаемой величиной $0.12m_e$, полученной из вычислений первых причин. Как указывалось ранее это инерционная масса квазисвободного носителя заряда. Эта масса является приведённой величиной по всем зонам и долином дающая вклад в плотность состояний всего объёма частично вырожденного полупроводника MnBi_2Te_4 . В точке Γ (рисунок 3.3.4.), из вычислений первых причин, существует ещё одна близлежащая зона $CB2$, с довольно высокой плотностью состояний и эффективной массой, равной $3m_e$. Из этого делается предположение о том, что наибольший вклад в общую концентрацию носителей заряда даёт сумма концентраций носителей заряда из двух уровней $CB1$ и $CB2$, а сама сумма выглядит следующим образом $N = N_{CB1} + N_{CB2}$. Для того, чтобы определить величину концентраций носителей заряда на каждом уровне, было использовано соотношение связывающее концентрацию носителей заряда и эффективную массу: $N_{Drude}m^* = N_{Drude}^{CB1}m^{1*} + N_{Drude}^{CB2}m^{2*}$. Такое соотношение для приведённой эффективной массы $m^* = 2.488m_e$ и эффективных масс $m^{1*} = 0.12m_e$ и $m^{2*} = 3m_e$ для двух уровней $CB1$ и $CB2$, соответственно, дало значения концентраций носителей заряда $N_{Drude}^{CB1} = 6.2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ и $N_{Drude}^{CB2} = 2.88 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ для двух уровней $CB1$ и $CB2$, соответственно.

Решив, оптимизационным путём, интеграл Ферми-Дирака для случая вклада двух уровней $CB1$ и $CB2$ в концентрацию носителей заряда, можно определить положение уровня Ферми и положения энергетического уровня $CB2$ относительно уровня $CB1$. Решение производилось итерационным методом. Для получения точного решения необходимо задать начальное значение самой итерации, начальными значениями выступали значение энергии Ферми и

энергетический зазор между энергией Ферми и уровнем $CB2$. Ранее энергия Ферми и энергетический зазор ($CB2 - E_F$) при помощи фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (в англоязычной литературе коротко ARPES) получилась равной $E_F = 187$ мэВ и $CB2 - E_F = -41$ мэВ в работе [22], $E_F = 199$ мэВ и $CB2 - E_F = -71$ мэВ в работе [34] и $E_F = 221$ мэВ и $CB2 - E_F = -71$ мэВ в работе [85]. Это означает что, энергия Ферми лежит выше дна уровня $CB2$. Используя эти данные как реперные для начала итерации удалось получить точные значения для образца $MnVi_2Te_4$. Оказалось что, полученная энергия Ферми равна $E_F = 188$ мэВ, а зазор между уровнем Ферми и уровнем $CB2$ ($CB2 - E_F$) равен 46 мэВ. Таким образом, уровень Ферми находится выше уровня $CB2$. Что удивительно, так как, вклад уровня $CB2$ в общую концентрацию носителей заряда превышает уровень $CB1$ (см. Рисунок 3.3.4.).

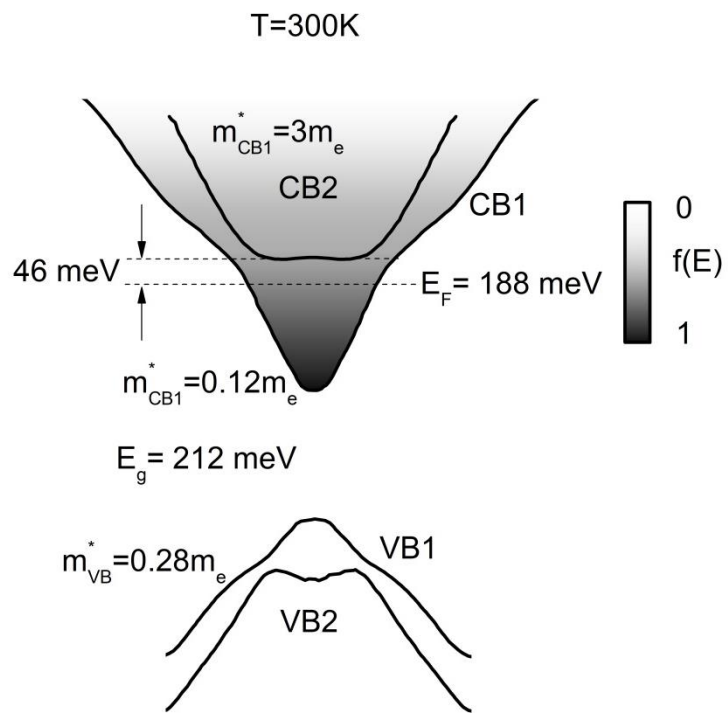


Рисунок 3.3.4. Схематическая демонстрация расчетной объемной зонной структуры MnBi_2Te_4 вдоль ΓY и ΓL

Зазор между уровнем Ферми и уровнем $CB2$ ($CB2 - E_F$) чуть меньше, чем $2k_B T = 51.4$ эВ, это соответствует случаю частичного вырождения. Из распределения Ферми-Дирака даже для частично вырожденного состояния имеются свободные носители заряда которые имеют достаточно большую энергию чтобы занять уровень $CB2$, также, как видно из схематической зоны структуры, плотность состояний на этом уровне весьма большая. Таким образом, вклад $CB2$ в общую концентрацию носителей заряда становится значительным при том условии что уровень Ферми имеет меньшую энергию чем уровень $CB2$.

3.4. Дисперсия плазмон-поляритонной волны в топологических изоляторах.

Оптический метаматериал – это композиционный материал, представляющий из себя периодически структурированную систему, обладающую уникальными электромагнитными свойствами, не присущи реальной природе и не достижимыми технологически. Метаматериалы обладают отрицательным эффективным показателем преломления [84], фотонной запрещенной зоной, односторонним пропусканием электромагнитной волны и т.д. Реализация этих уникальных свойств обеспечивается за счет варьирования особым образом структур с различной диэлектрической ϵ или магнитной проницаемостью μ . Метаповерхность это двухмерный (2D) метаматериал. Метаповерхности решают нетривиальными подходами ряд актуальных проблем, таких как повышения эффективности солнечных элементов, в плазмонных метаматериалах и в оптике. Солнечные элементы с интегрированной плоской линзой на основе метаповерхности позволяет фокусировать свет от солнца [81] и выполнять функцию ловушки для фотонов, избегая обратного отражения. Метаповерхности позволяют получить аномальное преломление [93], за счет чего решается проблема углового позиционирования солнечных элементов, таким образом, увеличивается эффективность преобразования солнечной энергии в электрическую, также привлекательна функция селективного отбора частот метаповерхностей. [45]

Важной характеристикой для плазмон-поляритонной волны является её дисперсия, определяющей разрешенные для распространения состояния плазмон-поляритонной волны, так как и в случае зонной структуры это соответствие между импульсом и энергией, волновым числом и частотой. Дисперсия плазмон-поляритонов - это зависимость их энергии от импульса. Важным свойством плазмон-поляритонов является то, что их дисперсия может быть контролируема. Это можно сделать путем изменения геометрии металлической структуры, ее материала или окружающей среды. Вид дисперсии сильно чувствителен к интерфейсу, то есть к границе раздела между проводящей и изолирующей средой. Конфигурация системы возбуждения поверхностной плазмон-поляритона для топологического изолятора, ввиду наличия объёмного и поверхностного состояния, представляет собой трехслойную систему. В данной трехслойной системе верхний слой является диэлектриком, срединный тонкий проводящий слой, являющийся областью с топологическими бесщелевыми Дираковскими состояниями и третий слой подложка с объёмными состояниями [98].

Каждый интерфейс между слоями может поддерживать связанные поверхностные плазмон-поляритонные волны. Когда толщина проводящего слоя соизмерима или меньше длины затухания, возникают связанные моды из-за взаимодействия между поверхностными плазмон-поляритонными волнами.

Дисперсия для такой системы примет сложный вид. Решив систему волновых уравнений, вид которого приведён в [57], получается трансцендентное уравнение, позволяющее определить дисперсионное соотношение, которое имеет вид:

$$e^{-2k_1 a} = \frac{\frac{k_1 + k_2}{\varepsilon_1 - \varepsilon_2} \cdot \frac{k_1 + k_3}{\varepsilon_1 - \varepsilon_3}}{\frac{k_1 - k_2}{\varepsilon_1 - \varepsilon_2} \cdot \frac{k_1 - k_3}{\varepsilon_1 - \varepsilon_3}} \quad (3.4.1)$$

здесь a – толщина проводящего слоя, $k_i^2 = \beta^2 - \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \varepsilon_i$ – волновое число устанавливающая связь между коэффициентом распространения поверхностного плазмон-поляритона β и частотой ω , а индексы 1,2 и 3,

указывают на слой соответствующие проводящей тонкой среде и двум различным не проводящим средам.

Толщина топологического слоя крайне мала, а условная подложка представляет собой частично вырожденный полупроводник с большой концентрацией носителей заряда, из-за чего связанные моды, возникающие на границе топологического слоя, слабозаметны на фоне плазменных возбуждений во всём топологическом изоляторе. Это подтверждается отсутствием на диэлектрической функции, извлечённой из спектроэллипсометрических измерений, особенностей обусловленных двумя связанными модами. Также, диэлектрическая функция топологического слоя в топологическом изоляторе остаётся не определённой, в связи с чем, применение многослойной модели для определения дисперсии плазмон-поляритонной волны на данный момент не возможно. Извлечение точной диэлектрической функции для топологического слоя является перспективной задачей будущих исследований. Таким образом, определение дисперсии плазмон поляритона была произведена с помощью более простой модели диэлектрик-проводник.

Волновое число плазменного возбуждения характеризуется комплексным числом и определяется из формулы ниже. Дисперсии объемного и поверхностного плазмон-поляритона рассчитывается из действительной части волнового вектора по формуле [13]:

$$\mathbf{k}(\omega) = \mathbf{k}_1 + i\mathbf{k}_2 = \left[\frac{\omega}{c} \left(\frac{\epsilon_r \epsilon_a}{\epsilon_r + \epsilon_a} \right)^{1/2} \right] + i \left[\frac{\omega}{c} \left(\frac{\epsilon_r \epsilon_a}{\epsilon_r + \epsilon_a} \right)^{3/2} \frac{\epsilon_i}{2(\epsilon_r)^2} \right] \quad (3.4.2)$$

Мнимая часть k_2 характеризует распространение плазмонного возбуждения вдоль границы раздела диэлектрик/проводник, длина свободного пробега $L_{SPP} = \frac{1}{2k_2}$. Длина свободного пробега соответствует расстоянию, на котором возбуждение плазмона затухает в e раз. Этот параметр позволяет охарактеризовать распространение поверхностного плазмона вдоль границы раздела между диэлектриком и проводником

На резонансной длине волны в случае LSPR важно выполнения условия Фрелиха. В частности для частицы в сферической форме, соотношение $|\epsilon_a + 2\epsilon_1|$ между диэлектрической функцией наночастицы $\epsilon = \epsilon_1 + i\epsilon_2$ и внешней среды ϵ_a должно быть минимальным. В упрощённом виде для малой ϵ_2 условие резонанса примет вид $\epsilon_a = -2\epsilon_1$. Для проводящих соединений (металлов) это условие достижимо. Фактор формы частицы оказывает существенное влияние на положение резонансной длины волны, так для эллипсоидальной или столбчатой структуры её можно смещать до инфракрасного спектра.

Вычисленные дисперсии $k(\omega)$ плазмон поляритона для каждой структуры приведены на рисунках ниже.

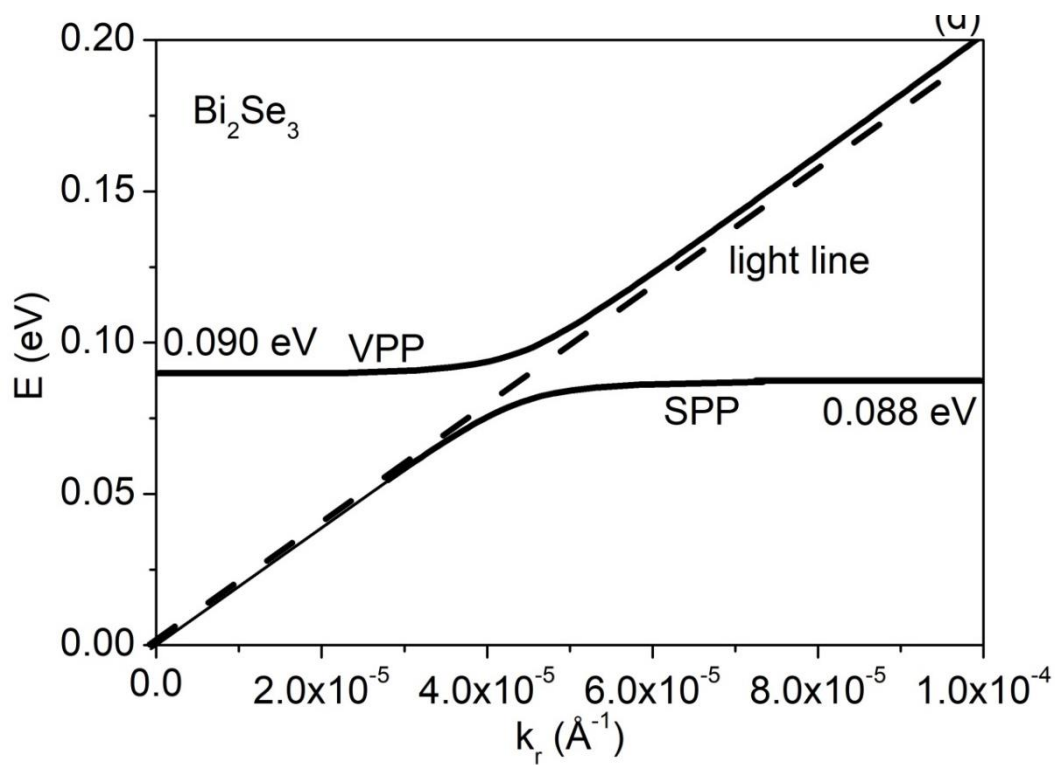


Рисунок 3.4.1. Дисперсия объемного (VPP) и поверхностного (SPP) плазмонов для Bi_2Se_3 , штриховая линия — линия света.

Энергия объемного плазмонного резонанса равна 0.090 eV для Bi_2Se_3 (рисунок 3.4.1.), а для поверхностного плазмонного резонанса ожидаемо ниже 0.088 eV. Эти величины не удовлетворяют соотношению между энергиями объемного ω_p и поверхностного ω_{srp} плазмон поляритоном, когда $\omega_{srp} = \frac{\omega_p}{\sqrt{1+\varepsilon_a}}$, где ε_a диэлектрическая постоянная внешней среды. Такое несогласие связано с тем, что часто применяемые соотношения соответствует упрощенному случаю диэлектрик-тонкий проводник-диэлектрик, и то при условии когда оба внешних диэлектрика один и тот же материал. При отличии диэлектриков решаемое волновое уравнение будет иметь иные граничные условие и вид дисперсии примет более сложный характер [98]. В рамках данной диссертации использовалась модель диэлектрик-проводник, что и соответствует изучаемому случаю.

Линия света обозначенная штриховой линией на рисунке 3.4.1. с графиком дисперсии плазмон поляритона вычислена для волнового числа электромагнитной волны $k_0 = \frac{\omega}{c}$.

Аналогичное поведение имеет место для энергии объемного плазмонного резонанса в Sb_2Te_3 равного 0.120 eV, и для поверхностного плазмонного резонанса 0.118 eV (рисунок 3.4.2.). Sb_2Te_3 основные носители заряда дырки а не электроны, но тем не менее, на нём также наблюдается плазмоны.

В структуре $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ концентрация носителей заряда выше, и поэтому энергии объемного плазмонного резонанса равного 0.153 eV, а для поверхностного плазмонного резонанса 0.147 eV, выше чем у выше указанных структур (рисунок 3.4.3.).

В структуре $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_{0.5}\text{Te}_{10}$ энергии объемного плазмонного резонанса равного 0.153 eV, а для поверхностного плазмонного резонанса 0.147 eV (рисунок 3.4.4.).

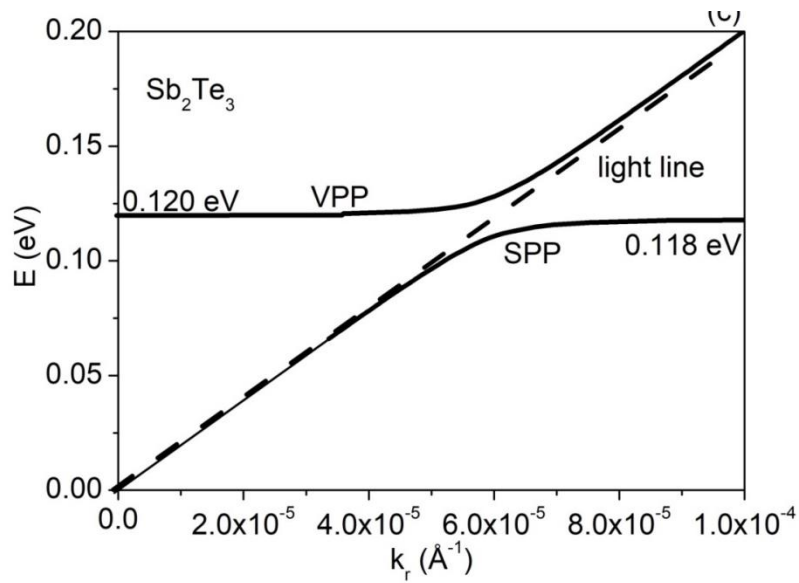


Рисунок 3.4.2. Дисперсия объемного (VPP) и поверхностного (SPP) плазмонов для Sb_2Te_3 , штриховая линия — линия света.

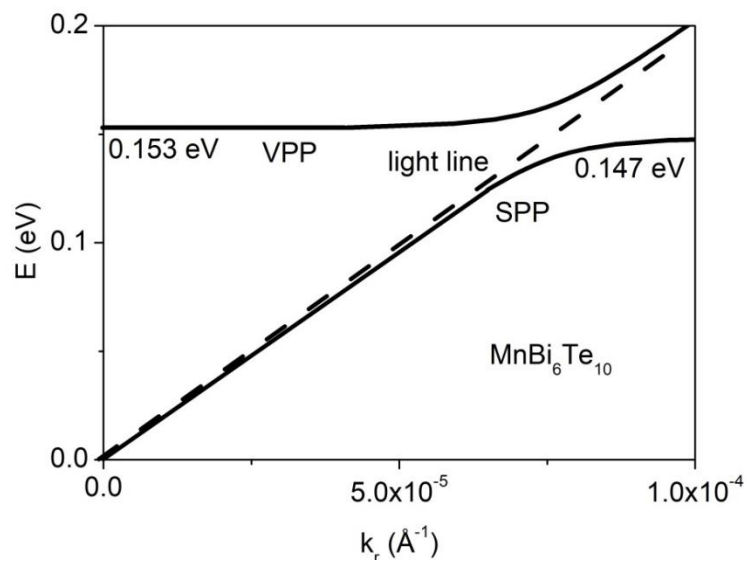


Рисунок 3.4.3. Дисперсия объемного (VPP) и поверхностного (SPP) плазмонов для $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$, штриховая линия — линия света.

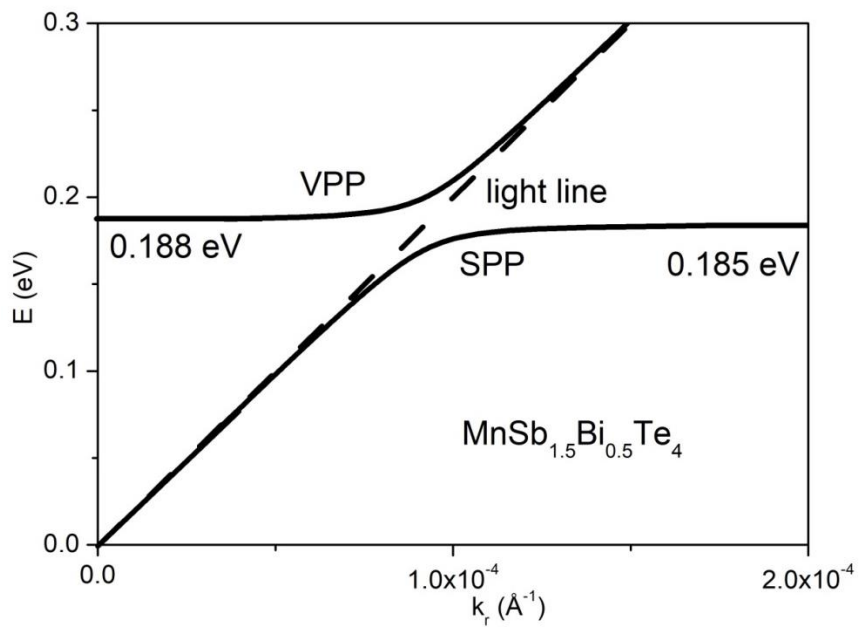


Рисунок 3.4.4. Дисперсия объемного (VPP) и поверхностного (SPP) плазмонов для $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_{0.5}\text{Te}_4$, штриховая линия — линия света.

3.5. Возбуждение и распространение плазмон-поляритона на границе раздела диэлектрик-проводник.

Прямое возбуждение поверхностного плазмон-поляритона воздействием электромагнитной волны физически сложно реализуемо, так как импульс электромагнитной волны меньше, чем импульс плазмона. Чтобы их сблизить необходимо «замедлить» электромагнитную волну. Для этого используют различные конфигурации. Самая распространённая конфигурация эта конфигурация Кречмана [66]. Она представляет из себя контакт проводящей плёнки и прозрачной призмы с большей диэлектрической постоянной, чем у воздуха (рисунок 3.5.1.). Электромагнитная волна вводится через призму.

Конфигурация Отто [66] является ещё одной конфигурацией возбуждения поверхностного плазмон-поляритона. Она похожа на конфигурацию Кречмана, с одним отличием, в конфигурации Отто между проводящей плёнкой и призмой присутствует тонкий воздушный зазор (рисунок 3.5.2.).

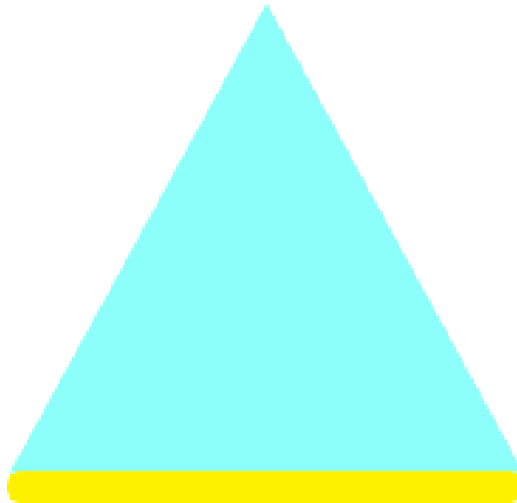


Рисунок 3.5.1. Конфигурация Кречмана, призма отмечена голубым, проводящая плёнка жёлтым



Рисунок 3.5.2. Конфигурация Отто, призма отмечена голубым, проводящая плёнка жёлтым, воздушный зазор между ними.

Конфигурации Кречмана и Отто, хотя очень просты в исполнении, но имеют серьёзные ограничения формой призмы и её материалом. Для различных диапазонов энергий фотона необходимо будет подбирать подходящую призму. Поэтому используют тонкую дифракционную решетку. Изменение периода дифракционной решётки позволяет подобрать подходящую для возбуждения поверхностного плазмон-поляритона конфигурацию. Связь между поверхностным плазмон поляритоном и пробирующей электромагнитной волной устанавливается по формуле (3.5.1) [57, 75].

$$k_{\text{spp}} = \frac{\omega}{c} \sin(\theta) \pm v \frac{2\pi}{a} \quad (3.5.1)$$

Также в последнее время стало применение методов локализации плазмонов, за счёт чего удаётся возбуждать уже локализованные поверхностные плазмон-поляритоны. Локализация производится за счёт создания поверхностей с различной текстурой и наночастиц с различной формой.

Чтобы подобрать правильную конфигурацию для возбуждения поверхностного плазмон-поляритона, важно иметь полное представление о всех параметрах плазмона, это дисперсия и глубина проникновения плазмон-поляритона.

Дисперсия для исследуемых образцов уже посчитана в главе 3.4. Глубина проникновения плазмон поляритона определяется расстоянием, на котором амплитуда плазмонных колебаний падает до $1/e$ от начальной амплитуды, то есть, этот параметр характеризует глубину на которой плазмон затухает в e – раз, это есть область возбуждения плазмона. Она характеризует на сколько z -компонента напряженности электрического поля падает с расстоянием от границы раздела проводник металл. Таким образом, можно оценить на какую глубину плазмон способен «прощупать» внешнюю среду. Это важный параметр для создания селективных детекторов.

Глубина проникновения получается по формуле $\delta_d = \frac{c}{\omega} \left| \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_a}{\varepsilon_a^2} \right|^{\frac{1}{2}}$ для диэлектрической среды и $\delta_m = \frac{c}{\omega} \left| \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_a}{\varepsilon_1^2} \right|^{\frac{1}{2}}$ для проводящей среды [13].

Глубина проникновения плазмон поляритона зависит от нескольких факторов, таких как материал, геометрия и размеры проводящей поверхности или наночастицы, а также от длины электромагнитной волны, которая возбуждает плазмон-поляритон. Обычно глубина проникновения плазмон поляритона составляет несколько десятков нанометров до нескольких микрометров.

Знание глубины проникновения плазмон-поляритона имеет важное значение для понимания взаимодействия света с наноструктурами, а также для разработки плазмонных устройств и нанотехнологий, таких как плазмонные датчики, усилители, солнечные батареи и технологии локальной поверхностной плазмонной резонансной спектроскопии.

Глубина проникновения поверхностного плазмон-поляритона для Bi_2Se_3 на энергии возбуждения поверхностного плазмона составила около 8.4 мкм как для интерфейса между диэлектриком и проводником (рисунок 3.5.3.). Это довольно большая величина, с учетом того что у золота она в несколько раз меньше, около 50 нм.

Глубина проникновения поверхностного плазмон поляритона для Sb_2Te_3 на энергии возбуждения поверхностного плазмона приняло несколько меньшее значение, и составила около 4.4 мкм (рисунок 3.5.4.).

Глубина проникновения поверхностного плазмон-поляритона для $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ на энергии возбуждения поверхностного плазмона приняло еще меньшее значение, и составила около 2.2 мкм (рисунок 3.5.5.).

Глубина проникновения поверхностного плазмон поляритона на плазменном краю для $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_6\text{Te}_{10}$ составляет около 8.6 мкм, а область возбуждения плазмон-поляритона резкая и узкая (рисунок 3.5.6.).

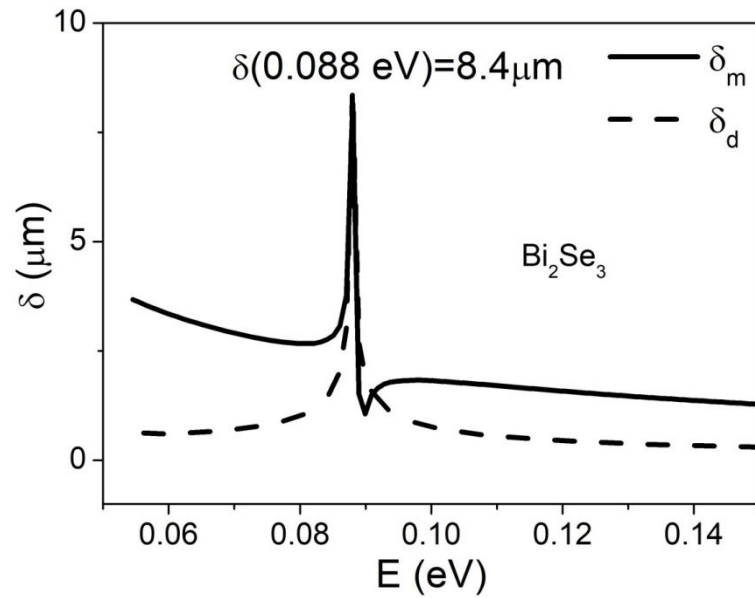


Рисунок 3.5.3. Глубина проникновения плазмонного возбуждения в проводник (сплошная линия) и диэлектрик (штриховая линия) для Bi_2Se_3

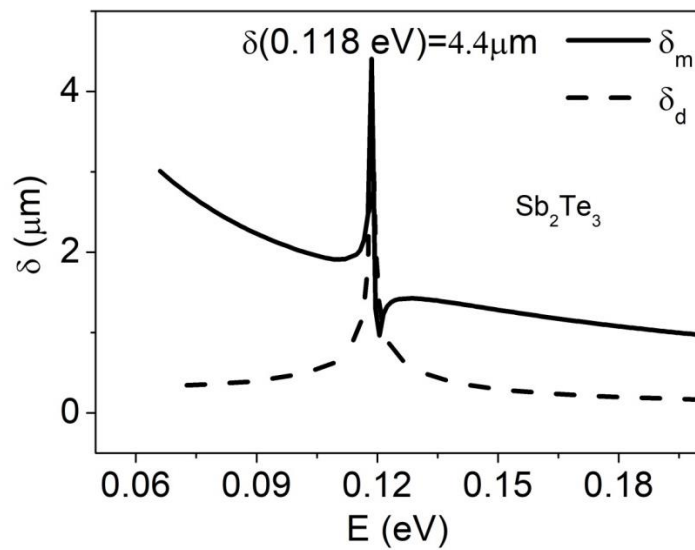


Рисунок 3.5.4. Глубина проникновения плазмонного возбуждения в проводник (сплошная линия) и диэлектрик (штриховая линия) для Sb_2Te_3

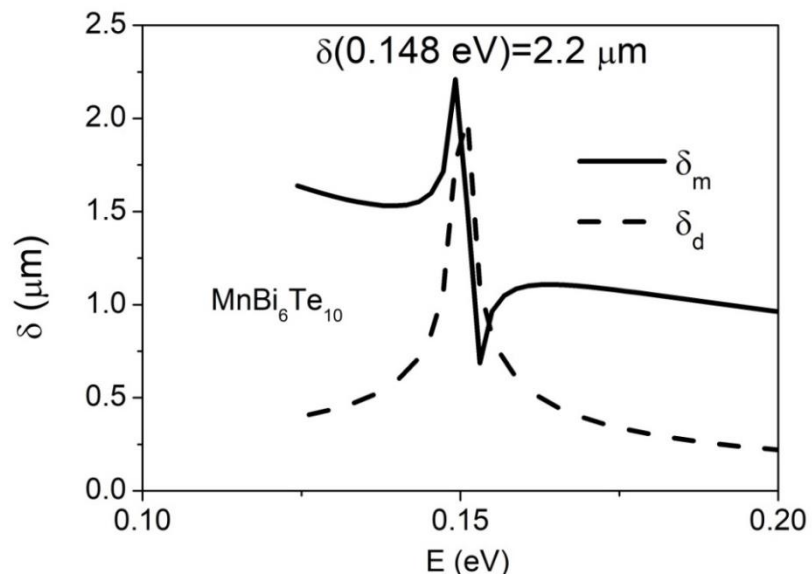


Рисунок 3.5.5. Глубина проникновения плазмонного возбуждения в проводник (сплошная линия) и диэлектрик (штриховая линия) для $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$

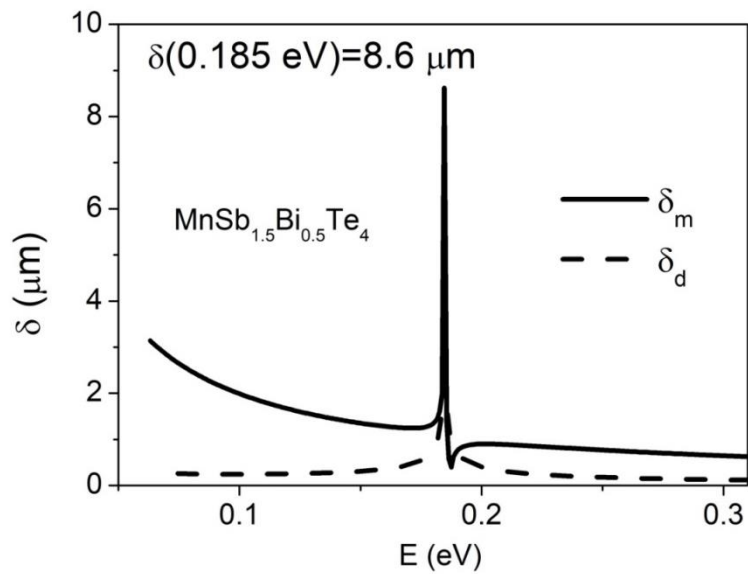


Рисунок 3.5.6. Глубина проникновения плазмонного возбуждения в проводник (сплошная линия) и диэлектрик (штриховая линия) для $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_6\text{Te}_{10}$

Знание глубины проникновения позволяет оптимизировать дизайн устройств и производить оптимальный отбор материалов. Глубина проникновения плазмон поляритона также играет важную роль в изучении взаимодействия света с проводниками и проводящими наноструктурами. Позволяет точнее описывать и анализировать плазменные возбуждения на проводящих поверхностях и наночастицах, что может привести к новым открытиям в области нанооптики и нанофотоники. Глубина проникновения плазмон-поляритона может использоваться для оптимизации эффективности энергетических систем, таких как солнечные батареи. Знание глубины проникновения позволяет оптимизировать толщину слоя проводника на поверхности солнечной батареи, чтобы максимизировать поглощение света и повысить эффективность преобразования света в электрическую энергию.

ГЛАВА IV

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ФУНКЦИЯ ТИ В ОБЛАСТИ ЭНЕРГИЙ ФОТОНА 0.7-6.4 эВ

4.1. Эллипсометрические параметры ТИ со структурой тетрадимита в области энергий фотона в ближнем ИК, видимом и ультрафиолетовом диапазонах электромагнитного излучения

Наличие двумерных поверхностных релятивистских бесщелевых Дираковских состояний в трехмерном топологическом изоляторе обусловлены топологией объемного изолятора. Таким образом, изучение объёмных свойств топологических изоляторов даст возможность продвинуться в понимании топологической природы материи.

Данная глава настоящей диссертации посвящена измерению и извлечению оптических параметров топологических изоляторов в диапазоне энергий 0.7-6.4 эВ. Используя метод спектроскопической эллипсометрии описанный в пункте 2.4.3 и эллипсометр J.A. Woollam M2000DI представленный в параграфе 2.5 с целью изучения оптических свойств топологических изоляторов, исследуемые в рамках данной диссертации, были получены эллипсометрические параметры. Этому диапазону преимущественно соответствует область энергий оптических разрешённых переходов.

Основные эллипсометрические параметры Ψ и Δ были измерены на спектроскопическом эллипсометре (см. рисунки 4.1.1. и 4.1.2.) на различных углах для соединений Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 , $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ (где $n = 0, 1, 2, \dots$). Плоскость падения и отражения пробирующего луча света была ориентирована перпендикулярно относительно плоскостей слоёв исследуемых соединений, что соответствует ориентации $\mathbf{E} \perp \mathbf{C}$. Измерение в ориентации соответствующе конфигурации $\mathbf{E} \parallel \mathbf{C}$, не представлялось возможным, из-за технических сложностей, образцы со стабильной стехиометрией имеют крайне мелкие размеры, в особенности имели малые толщины. Для измерения эллипсометрических параметров в указанной конфигурации необходимо произвести более сложный эксперимент.

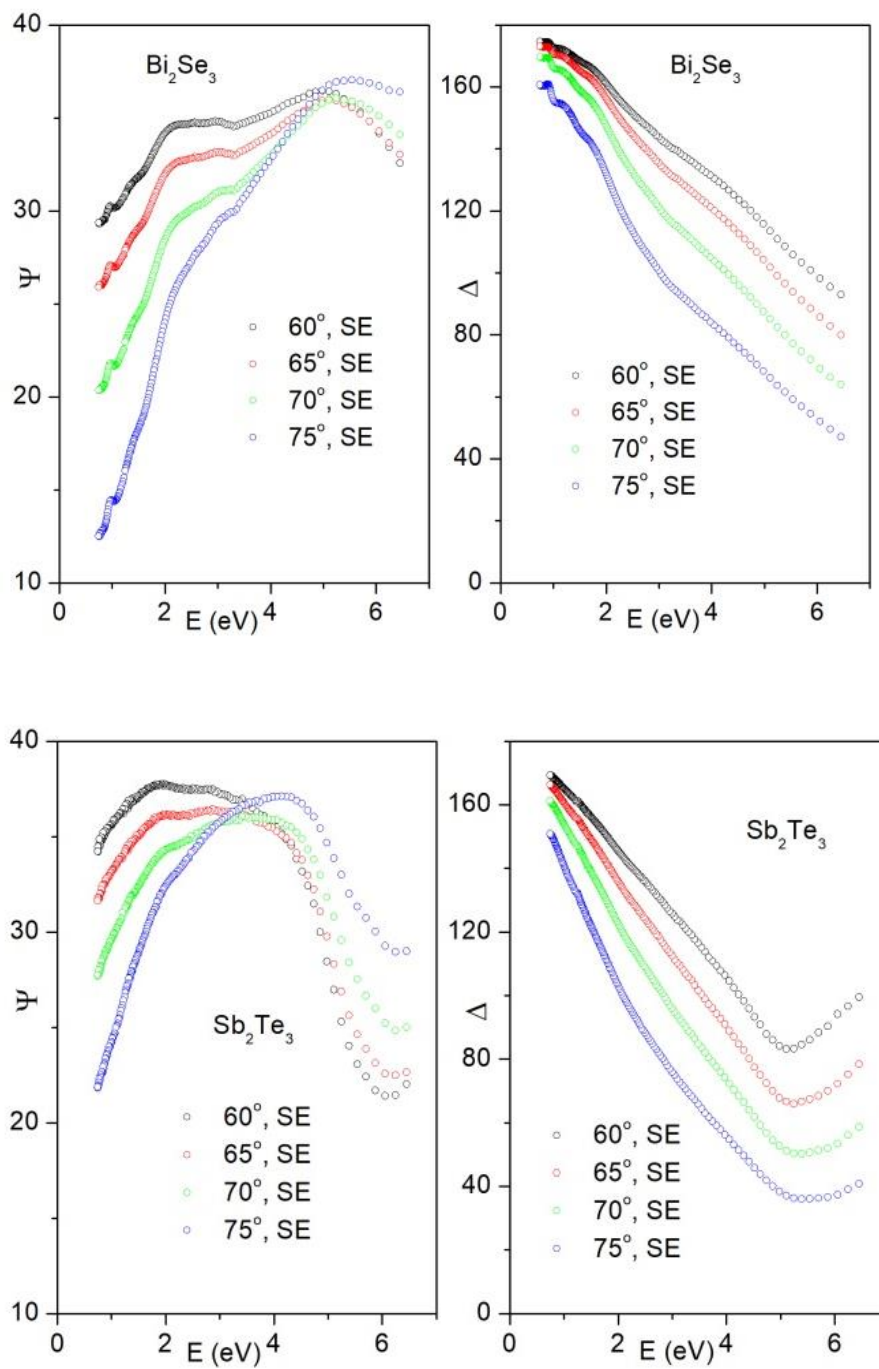


Рисунок 4.1.1. Основные эллипсометрические параметры Ψ и Δ для соединений Bi_2Se_3 и Sb_2Te_3

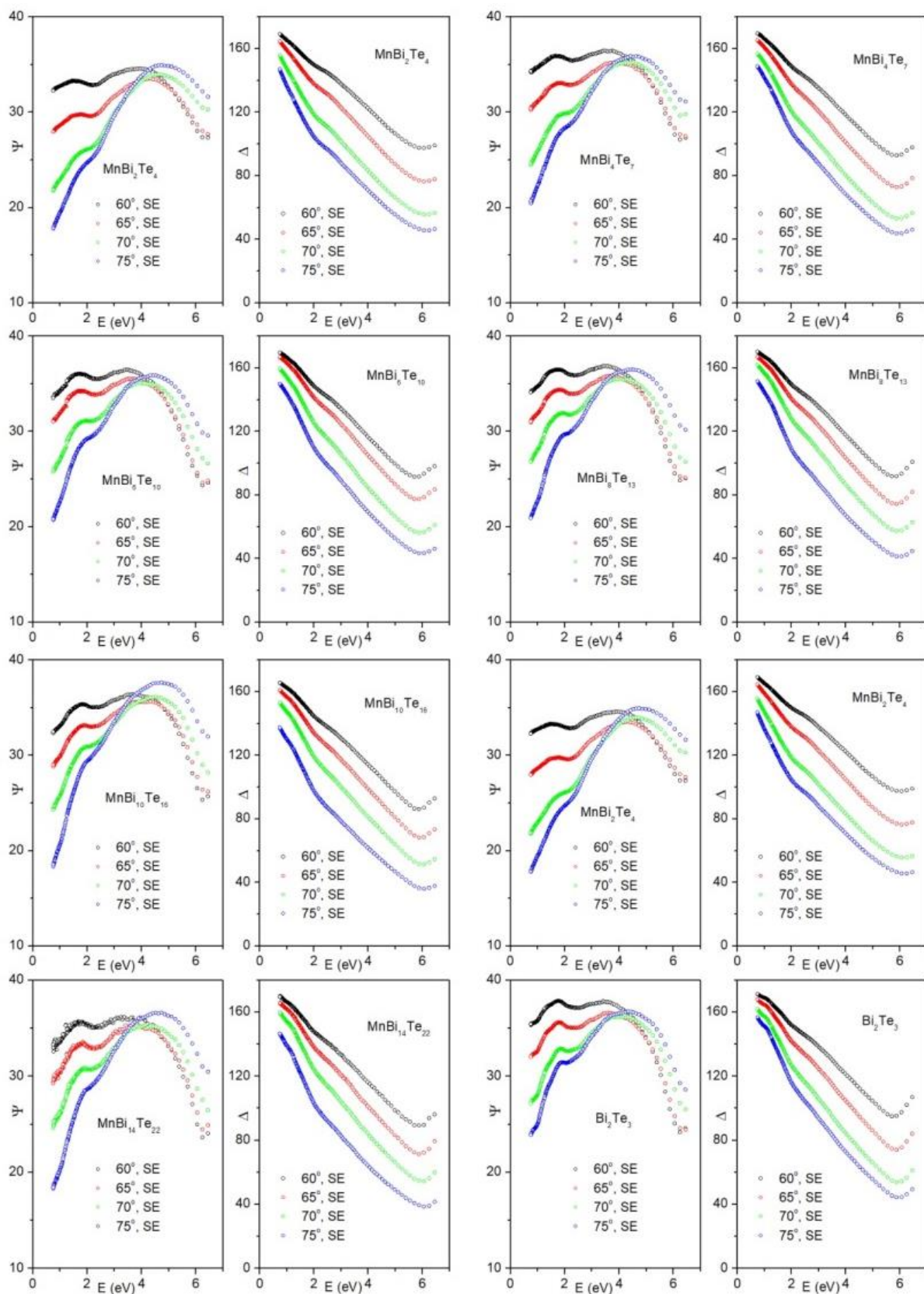


Рисунок 4.1.2. Основные эллипсометрические параметры Ψ и Δ для соединений $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ (где $n = 0, 1, 2, \dots$)

Одной из основных задач исследований топологических изоляторов это инженерия зонной структуры и управление уровнем Ферми, таким образом, чтобы отделить объёмные состояния от поверхностных Дираковских состояний. Первым в голову приходящим решением является получение твёрдых растворов на основе топологических изоляторов. MnBi_2Te_4 является частично вырожденным полупроводником с электронной проводимостью, а MnSb_2Te_4 является полупроводником с дырочной проводимостью, твёрдый раствор на их основе мог бы решить проблему по запираению объёмных состояний, и изменить уровень Ферми.

Основные эллипсометрические параметры Ψ и Δ для соединения MnSb_2Te_4 представлены на рисунке 4.1.2..

Твёрдый раствор $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_{0.5}\text{Te}_4$ был получен с целью изучения возможности управления уровнем Ферми и получения топологического изолятора с собственной проводимостью за счёт механизмов компенсации концентрации носителей. Основные эллипсометрические параметры Ψ и Δ для $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_{0.5}\text{Te}_4$ приведены на рисунке 4.1.4..

Измерены основные эллипсометрические параметры Ψ и Δ в области энергии фотона от 0.7 эВ до 6.4 эВ для соединений с эффектом Рашбы $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x\text{TeI}$, для $x=0, 0.05$ и 0.1 . Параметры в графической форме приведены на рисунке 4.1.5.

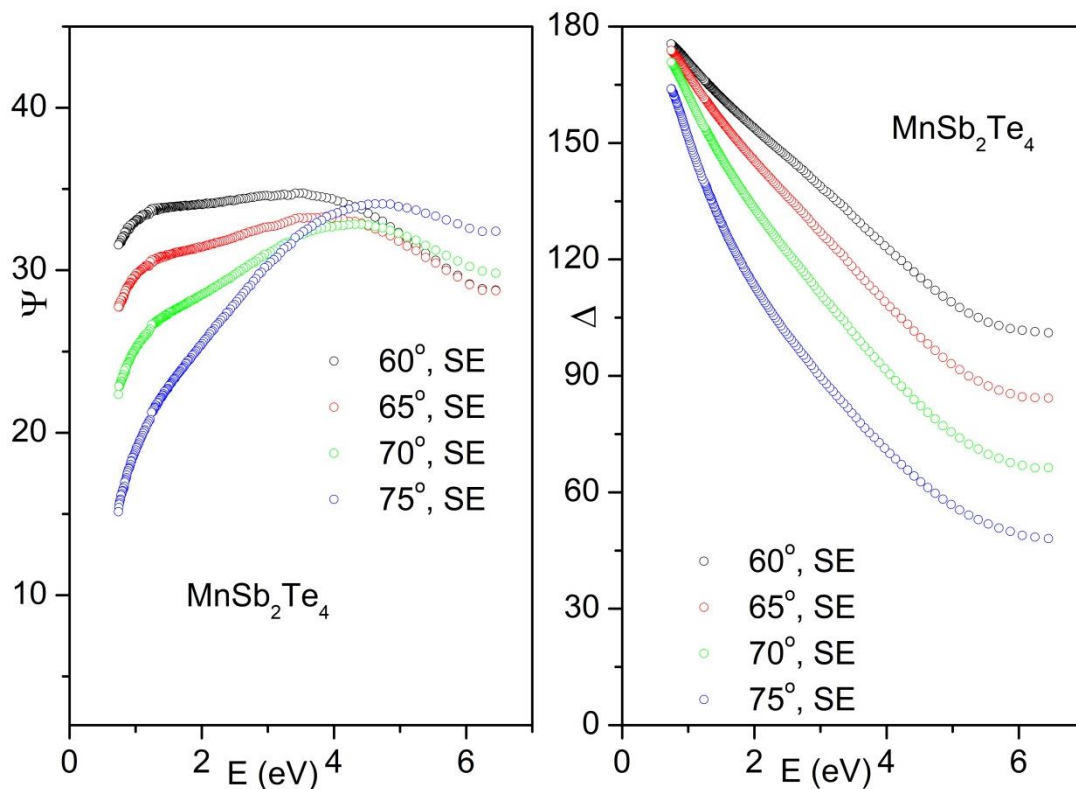


Рисунок 4.1.3. Основные эллипсометрические параметры Ψ и Δ для соединений MnSb_2Te_4

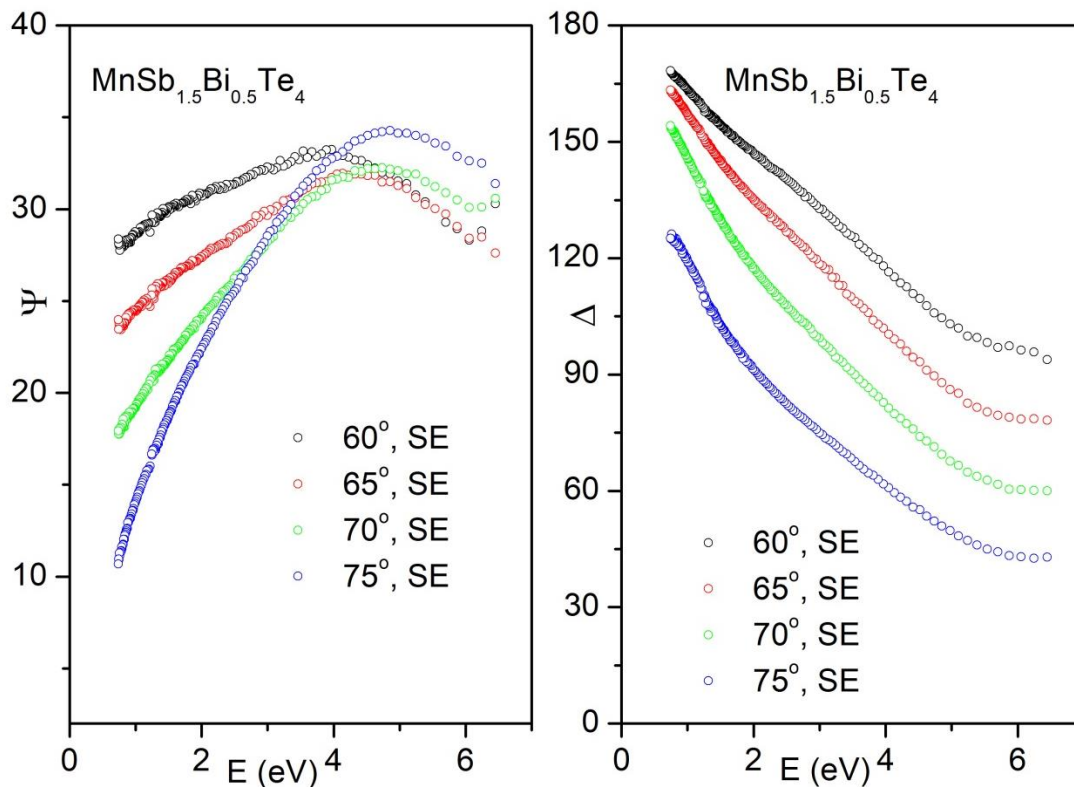


Рисунок 4.1.4. Основные эллипсометрические параметры Ψ и Δ для соединений $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_{0.5}\text{Te}_4$

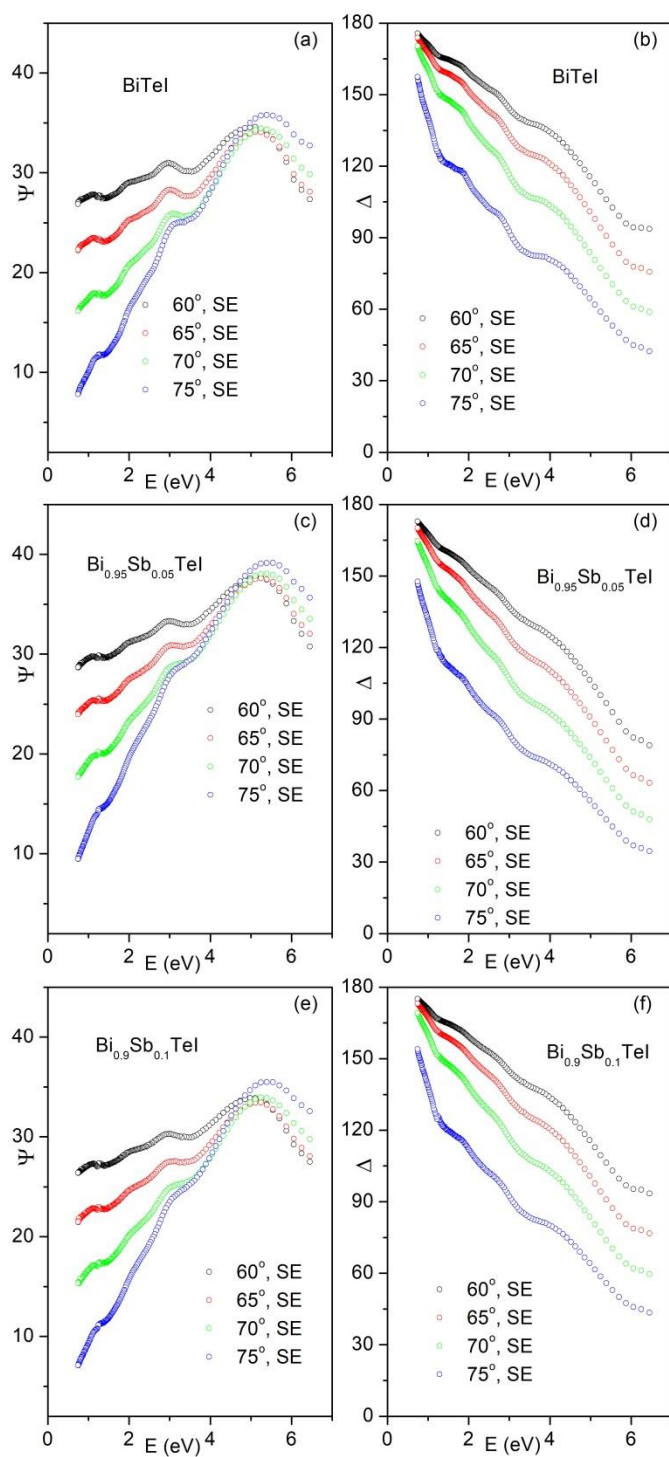


Рисунок 4.1.5.. Основные эллипсометрические параметры Ψ и Δ для соединений $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x\text{TeI}$, для $x=0, 0.05$ и 0.1

С помощью измеренных основных эллипсометрических параметров Ψ и Δ были извлечены зависимости от энергии фотона обоих компонент тензора диэлектрической функции. Так как образцы кристаллов являлись объемными, оптическая модель представляет собой воздух-полубесконечная подложка. При такой схеме извлечённая из эллипсометрических измерений диэлектрическая функция, соответствует диэлектрической функции исследуемого образца. На рисунках ниже приведены зависимости диэлектрической функции от энергии фотона для области спектра 0.7-6.4 эВ, в которой наблюдаются оптические межзонные переходы. Дисперсия в приведённой области спектра обусловлена разрешёнными прямыми межзонными переходами, такой вывод можно сделать из отсутствия характерных для дисперсии на свободных носителях особенностей, а для фононов слишком большие энергии и других эффектов не наблюдается. В том числе не наблюдаются характерные экситону особенности, так как его проявление на спектре диэлектрической функции происходит на краю поглощения связанной с величиной запрещённой зоны. В контексте межзонных переходов мнимая часть диэлектрической функции является функцией формы для распределения комбинированной плотности состояния.

На рисунке 4.1.6. представлена зависимость действительной и мнимой частей тензора диэлектрической функции от энергии фотона для Bi_2Se_3 и Sb_2Te_3 . Так как угловой зависимости диэлектрической функции не наблюдалось, то измеренная в данной конфигурации компонента диэлектрической функции преимущественно соответствует перпендикулярной компоненте тензора диэлектрической функции. Край поглощения около запрещённой зоны в данном спектре не наблюдается, так как Bi_2Se_3 и Sb_2Te_3 являются узкозонными полупроводниками. Из обзорной работы [37] ширину их запрещённой зоны оценивают около 160 мэВ и 168 для Bi_2Se_3 и Sb_2Te_3 , соответственно. Важно отметить, что точное определение ширины запрещённой зоны является пока нерешённой задачей, из-за причин указанных в предыдущей главе, трудно получить однородный кристалл с собственной проводимостью.

На дисперсии видны явные особенности в энергии 0.920 eV и 1.900 eV для Bi_2Se_3 . На дисперсии Sb_2Te_3 видна одна явная особенность в энергии 1.228 eV. Для подробного анализа и определение точного положения энергий межзонных переходов на реальной структуре был проведен анализ критических точек. Результаты анализа критических точек даны в следующем параграфе.

Диэлектрическая функция для гомологического ряда соединений $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ с $n=0,1,2,3,4,5,6$ и Bi_2Te_3 приведена на рисунке 4.1.7.. На дисперсии видны явные особенности в энергиях 0.870 eV, 1.205 eV и 2.500 eV. Результаты анализа критических точек приведены в следующем параграфе.

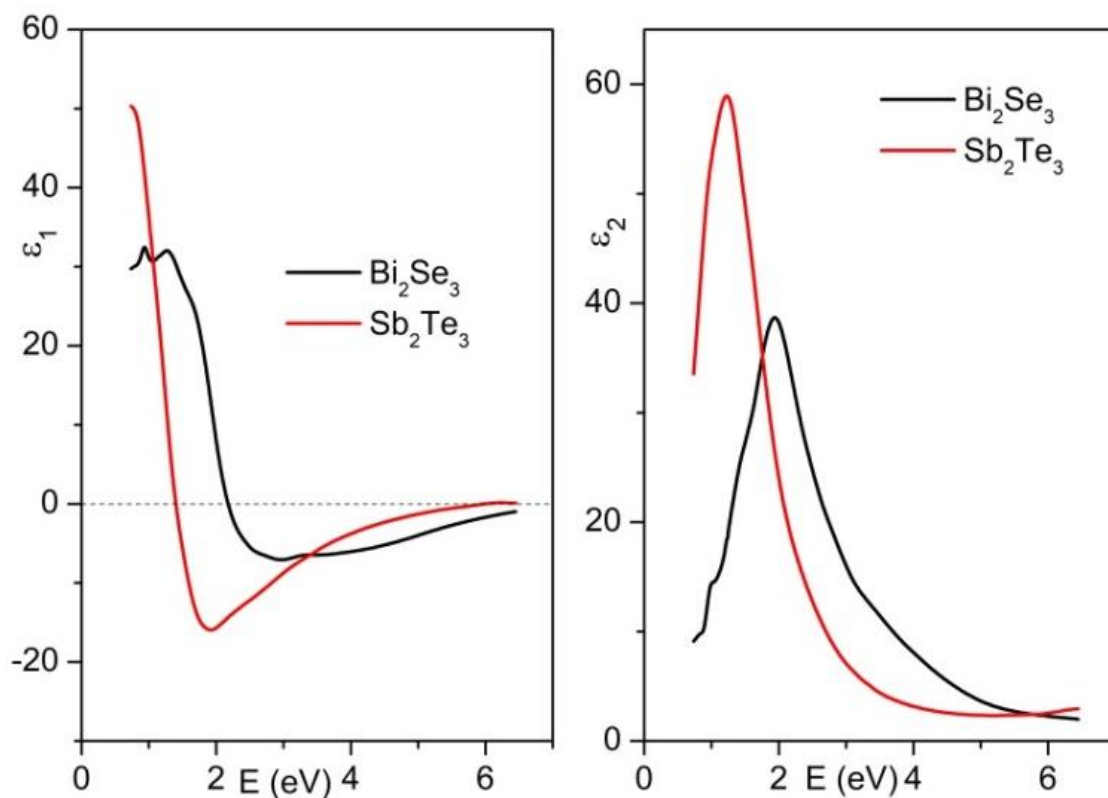


Рисунок 4.1.6. Зависимость действительной (слева) и мнимой (справа) компоненты диэлектрической функции от энергии фотона для Bi_2Se_3 Sb_2Te_3

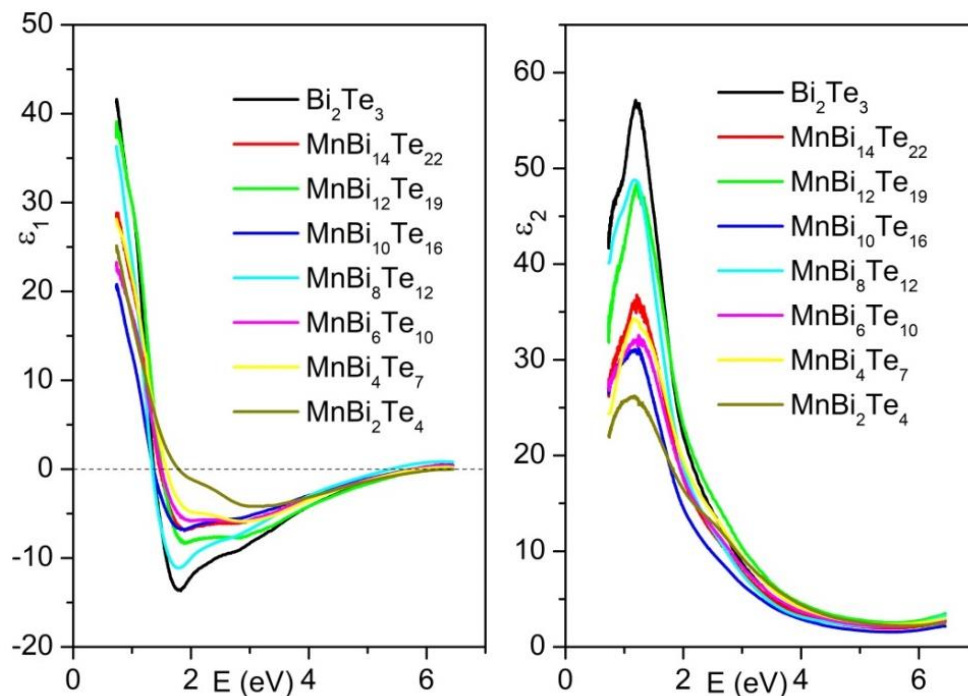


Рисунок 4.1.7. Зависимость действительной (слева) и мнимой (справа) компоненты диэлектрической функции от энергии фотона для гомологического ряда $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ с $n=0,1,2,3,4,5,6$ и Bi_2Te_3

Как видно из рисунка 4.1.7., наблюдается сдвиги на энергии $E(\varepsilon_1 = 0)$, данный сдвиг не имеет закономерности в зависимости от n . Не смотря на то, что выше утверждается о преимущественно вкладе межзонных переходов в диэлектрическую функцию, в этой области энергий фотона на действительной части диэлектрической функции также имеется область с отрицательными значениями, такое поведение действительной части диэлектрической функции присуще плазменным возбуждениям или плазменный отклик [8].

Плазменный отклик в структурах типа тетрадимита охватывает широкую область спектра видимого света. Плазменный отклик полупроводников в ультрафиолетовом (УФ) диапазоне, вероятно, связан с сильными межзонными переходами или валентными электронами. Таким образом, изучение этого явления даст важную информацию о природе зонных структур и даже о топологических эффектах. Точная природа этого явления на данный момент пока неясна и требуется дополнительное исследование этого явления в будущем.

В связи с этим изучение плазменного отклика в $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ $n=0,1,2,3,4,5,6$ и ∞ представляется интересным и важным.

На рисунке 4.1.8. приведен график действительной части диэлектрической проницаемости в диапазоне энергий фотонов от 1 до 6 эВ в области наблюдения плазменного отклика.

Как видно из графиков, плазменный отклик для разных материалов охватывает широкий диапазон света от 1.3 эВ до 6 эВ и имеет тенденцию изменяться для разных составов [8].

Диэлектрическая функция MnSb_2Te_4 (слева) и $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_{0.5}\text{Te}_4$ (справа) представлена на рисунке 4.1.8.. Извлеченная диэлектрическая функция не имела угловую зависимость, а значит она соответствует перпендикулярной компоненте тензора диэлектрической функции.

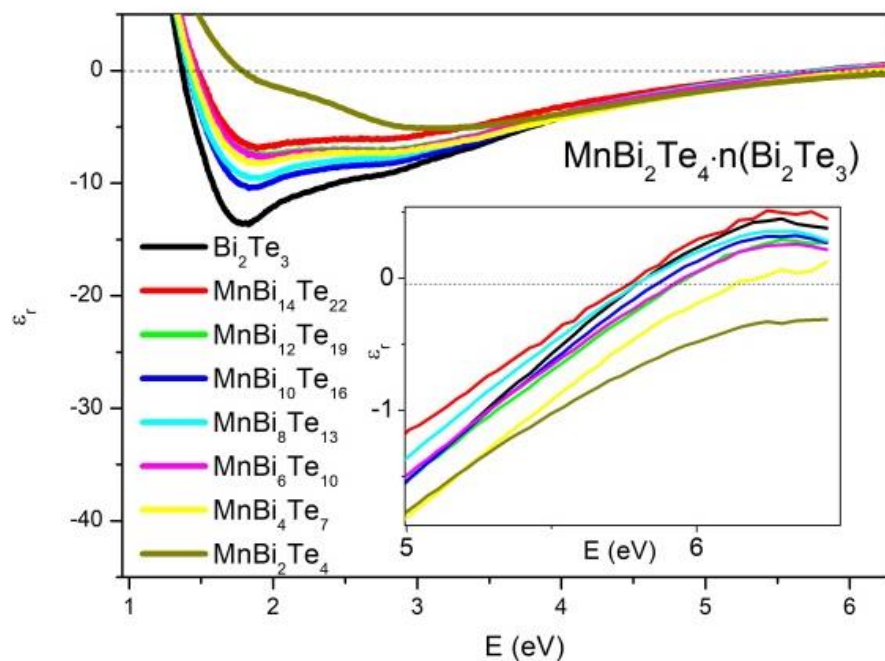


Рисунок 4.1.8. График действительной части диэлектрической функции в соединениях $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ $n=0,1,2,3,4,5,6$ и ∞ . Вставка: График действительной части диэлектрической функции в точке пересечения 0.

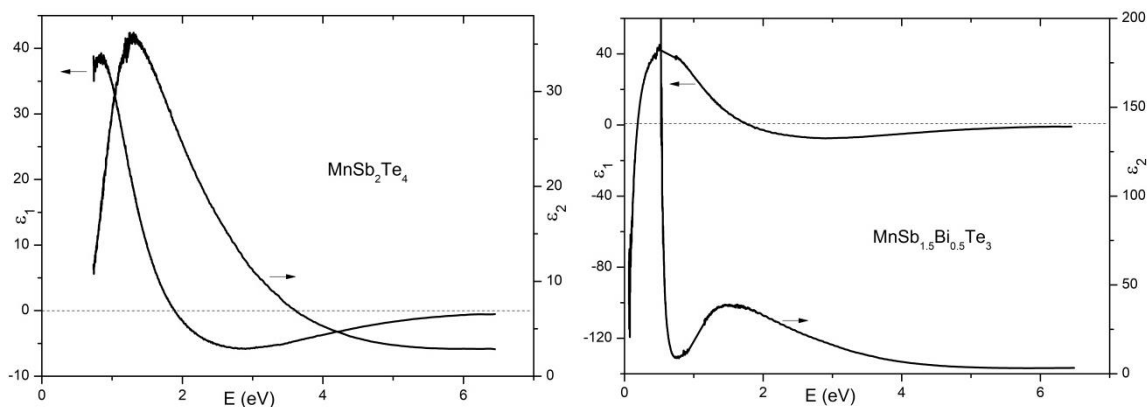


Рисунок 4.1.8.. Зависимость действительной и мнимой части тензора диэлектрической функции от энергии фотона для соединений MnBi_2Te_4 (слева) и $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_{0.5}\text{Te}_4$ (справа)

4.2. Критические точки и диэлектрическая функция ГИ

Для гомологического ряда соединений MnBi_2Te_4 $n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ с $n=0, 1, 2, 3, 4$ и Bi_2Te_3 диэлектрическая функция анализировалась с целью определить критические точки. Используя подход, описанный в разделе 2.3.2. извлечена информация о критических точках изучаемых соединений.

Анализ критических точек произведён для Bi_2Te_3 во вторых производных диэлектрической функции в диапазоне энергий фотона 0.7-6.4 эВ, в которой происходят оптические переходы (рисунок 4.2.1.).

Трёхмерная критическая точка наблюдается на энергии фотона 0.98 эВ. Двухмерные критические точки наблюдаются на энергии 1.09 эВ, 1.26 эВ и на 1.81 эВ. Все наблюдаемые точки относились к смешенному типу точек. Критических точек выше 2 эВ не наблюдается, в этой области значителен вклад валентной плазмы, вклад межзонных переходов не велик. Коэффициент корреляции превысил 0.95, согласие аппроксимации с экспериментом высокое.

Ниже на рисунке приведены результаты анализа критических точек для MnBi_2Te_4 (рисунок 4.2.2.). Все критические точки относятся к двумерному смешенному типу критических точек. В энергии 0.82 эВ наблюдается первая критическая точка в изучаемом спектре, фазовый угол в этой точке равнялся нулю. Две близкие критические точки в 0.95 эВ и в 1.26 эВ, имеют схожие значения фазового угла ≈ 1 , с осторожностью можно предположить, что эти близкие по значению энергии могут быть спин-орбитальным расщеплением одного уровня с Δ равной 0.31 эВ. Для проверки этого предположения необходимо отдельное исследование при различных температурах. Также, наблюдались критические точки в энергиях 1.57 эВ, 2.24 эВ и 3.17 эВ. Точка 3.17 эВ имеет фазовый угол равны 3.38 что имеет близкое значению к π соответствующая двумерной критической M_3 . Выше полученных значений энергий не наблюдалось. Аппроксимация одинаково хорошо согласуется с полученными экспериментальными данными как для действительной (рисунок 4.2.2., слева), так и для мнимой компонент (рисунок 4.2.2., справа) второй производной диэлектрической функции.

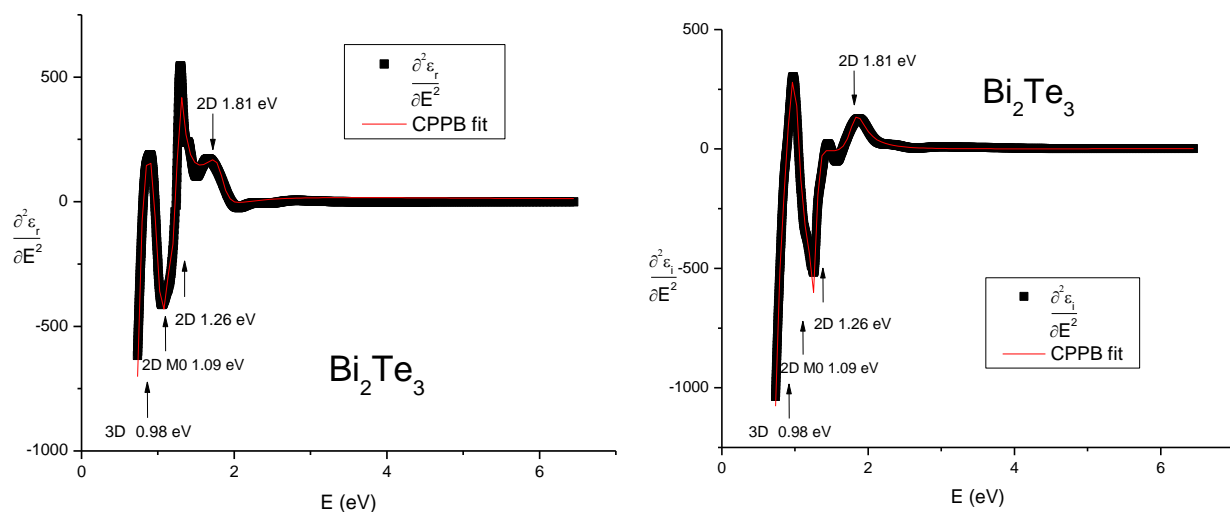


Рисунок 4.2.1. Анализ критических точек Bi_2Te_3 на производной второго порядка действительной (слева) и мнимой (справа) частях диэлектрической функции

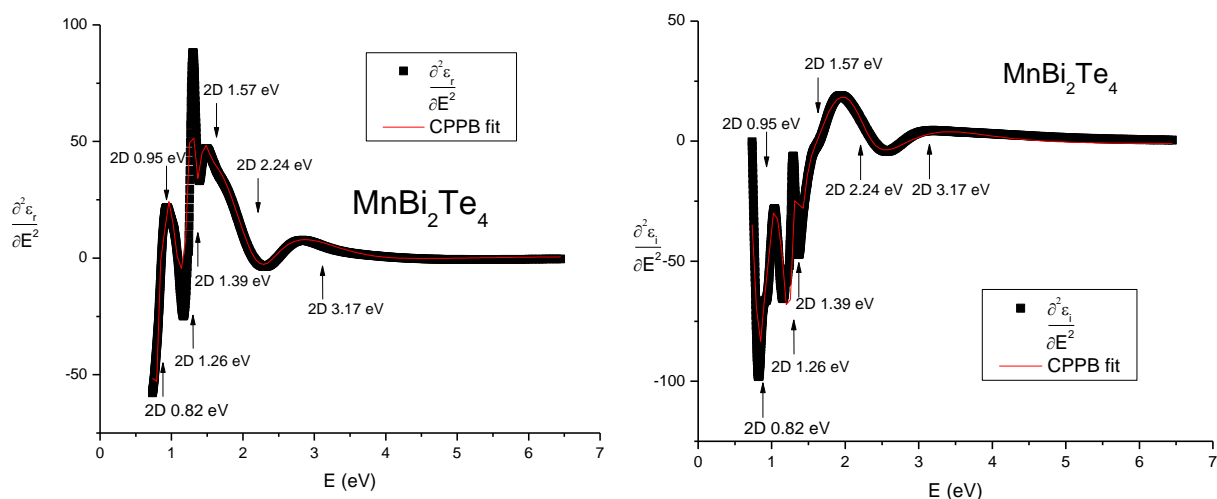


Рисунок 4.2.2. Анализ критических точек MnBi_2Te_4 на производной второго порядка действительной (слева) и мнимой (справа) частях диэлектрической функции

На рисунке 4.2.3. с графиками экспериментальной и подгоночной второй производной диэлектрической функции приведены результаты анализа критических точек для MnBi_4Te_7 . Двухмерные критические точки наблюдались в энергиях 0.91, 1.24, 1.42, 1.6 и 2.55 эВ. Критическая точка с энергией 1.8 эВ соответствует трёхмерной критической точки. Все критические точки относились к смешенному ввиду точек, так как, фаза в фазовом множителе не принимала кратные целому числу $\pi/2$ значения.

На рисунке 4.2.4. с графиками экспериментальной и подгоночной второй производной диэлектрической функции приведены результаты анализа критических точек для трёхмерных соединений $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$, $\text{MnBi}_8\text{Te}_{13}$, $\text{MnBi}_{10}\text{Te}_{16}$. Как можно заметить, как из диэлектрической функции так из её второй производной, с ростом числа встроившихся слоёв Bi_2Te_3 между слоями MnBi_2Te_4 , изучаемые соединения всё ближе становятся похожими по форме на Bi_2Te_3 . Как и данные комбинационного рассеяния, так и из диэлектрической функции с ростом числа пятислойных пакетов происходит плавный переход диэлектрической функции от конечного состава содержащее только семислойный пакет MnBi_2Te_4 к соединению Bi_2Te_3 содержащий лишь пятислойный пакет. Представленные в виде графиков энергии критических точек в зависимости от числа n слоёв Bi_2Te_3 в MnBi_2Te_4 $n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ очень хорошо показывают этот тренд. Для удобства все результаты полученных критических точек приведены в таблице 4.2.1.

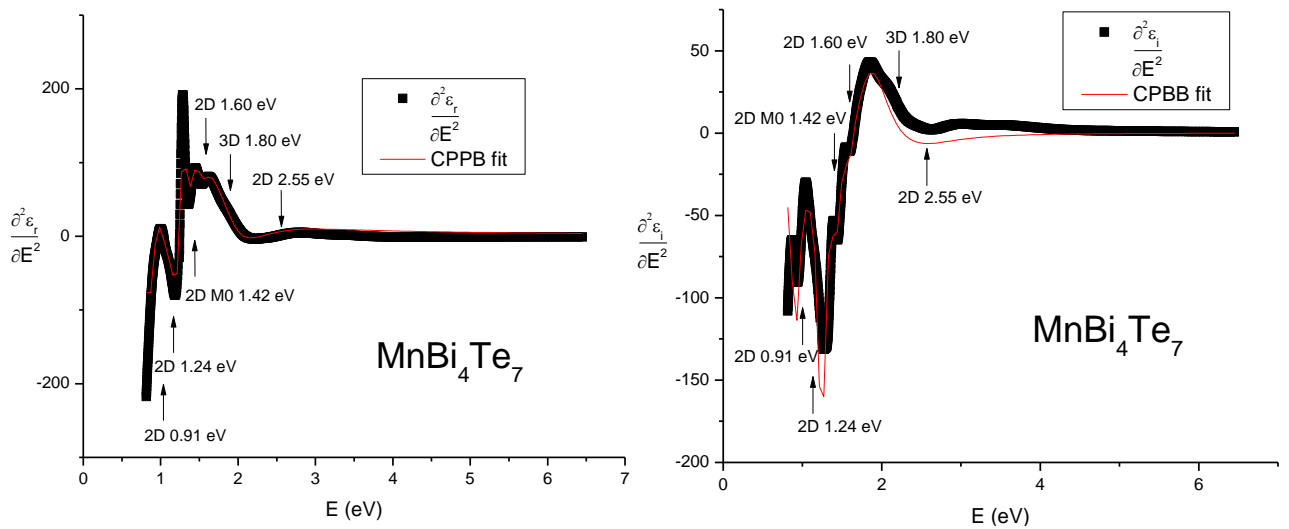


Рисунок 4.2.3. Анализ критических точек MnBi_4Te_7 на производной второго порядка действительной (слева) и мнимой (справа) частях диэлектрической функции

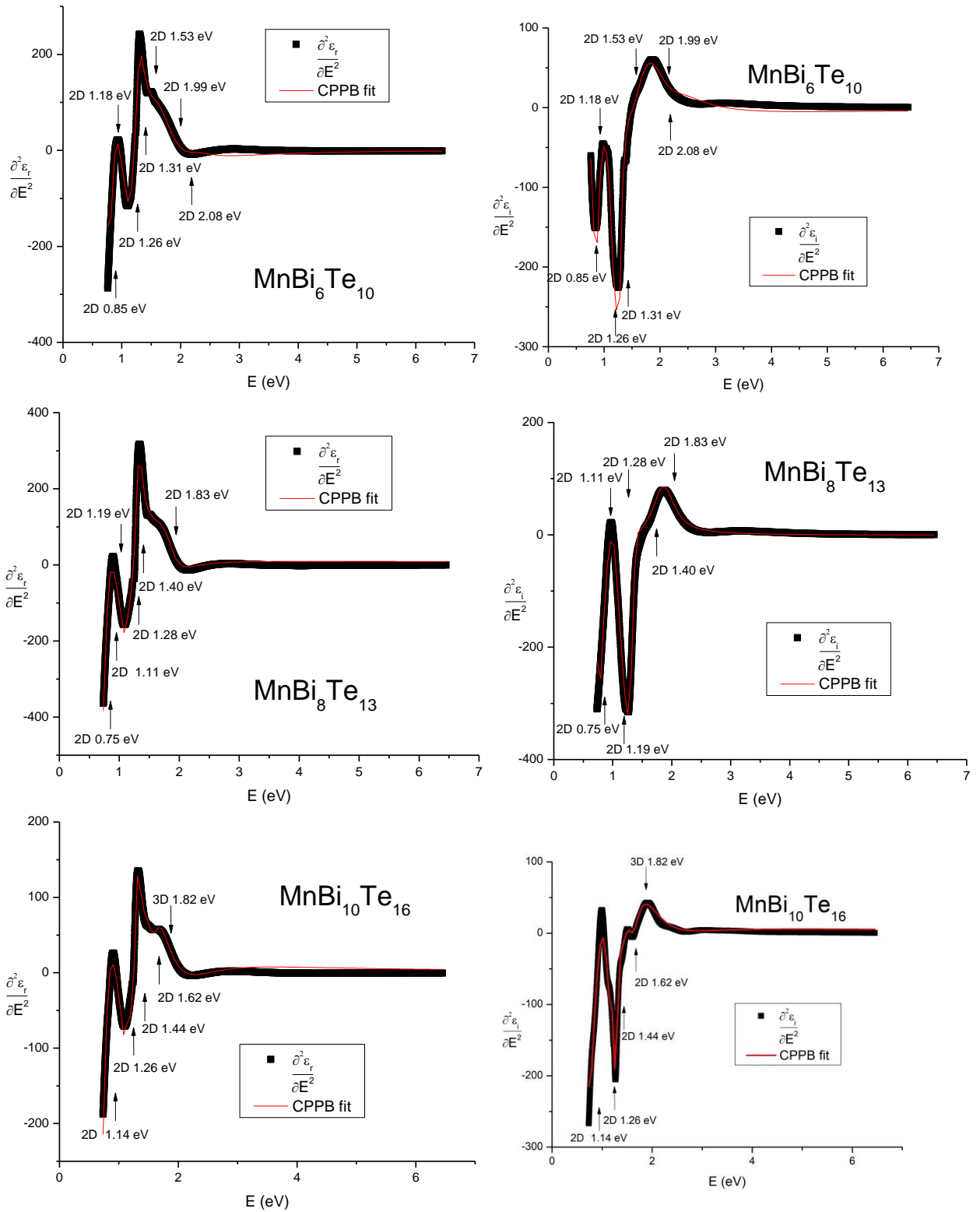


Рисунок 4.2.4. Анализ критических точек $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$, $\text{MnBi}_8\text{Te}_{13}$, $\text{MnBi}_{10}\text{Te}_{16}$ на производной второго порядка действительной (слева) и мнимой (справа) частях диэлектрической функции

Таблица 4.2.1. Критические точки структур типа тетрадимит

Соединение	Критическая точка (eV)						
Bi_2Te_3	0.98 2D	1.09 2D	1.26 2D	1.81 3D			
MnBi_2Te_4	0.82 2D	0.95 2D	1.26 2D	1.57 2D	2.24 2D		
MnBi_4Te_7	0.91 2D	1.24 2D	1.42 2D	1.60 2D	1.80 3D	2.55 2D	
$\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$	0.85 2D	1.18 2D	1.27 2D	1.31 2D	1.53 2D	1.99 2D	2.08 2D
$\text{MnBi}_8\text{Te}_{13}$	0.75 2D	1.11 2D	1.19 2D	1.28 2D	1.40 2D	1.83 3D	
$\text{MnBi}_{10}\text{Te}_{16}$	1.14 2D	1.26 2D	1.44	1.62	1.82 3D		

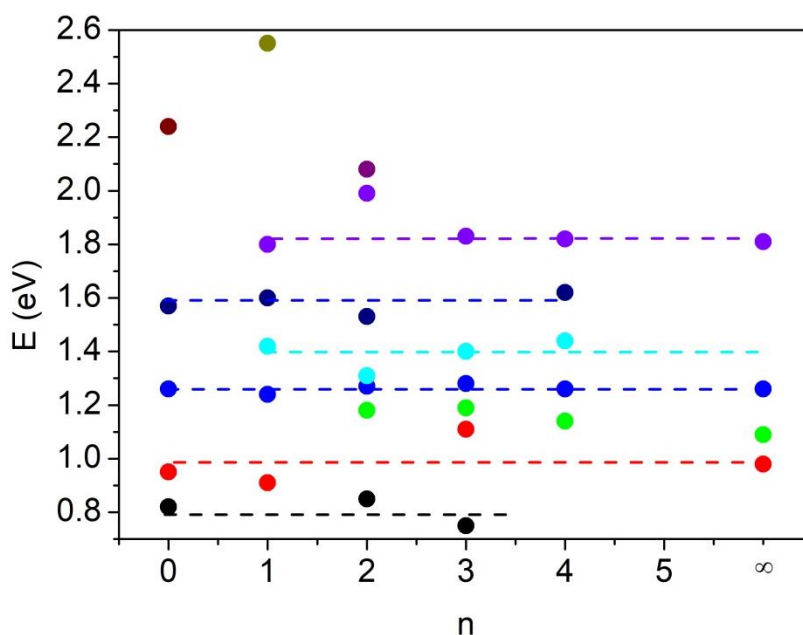


Рисунок 4.2.5. Энергии критических точек в зависимости от числа n слоёв Bi_2Te_3 в $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$

4.3. Диэлектрическая функция и зонная структура ТИ

4.3.1. Диэлектрическая функция и электронная структура слоистых соединений Bi_2Se_3 , Sb_2Te_3 и Bi_2Te_3

Расчеты зонной структуры из первых принципов проводились с использованием полнопотенциального метода линейаризованных присоединенных плоских волн (FP LAPW), основанного на теории функционала плотности (DFT) и коде WEIN2k [18]. Влияние релятивистских эффектов на электронные свойства кристаллов учтено в скалярно-релятивистском приближении со спин-орбитальным взаимодействием. Расчёты зонной структуры были проведены в рамках работы [59, 60].

Используя правило сумм, высокочастотная диэлектрическая проницаемость может быть выражена через мнимую часть диэлектрической функции (ϵ_i) следующим образом

$$\epsilon_{\infty} = 1 + \frac{2}{\pi} \int_{E_g}^{\infty} \frac{\epsilon_i(E)}{E} dE \quad (4.3.1)$$

где E_g — ширина запрещенной зоны. В рамках рассчитанной зонной структуры интегрирование межзонных оптических переходов по всей зоне Бриллюэна даёт значения мнимой части тензора диэлектрической функции ϵ_i , приведенной для каждого из рассматриваемых соединений на рисунке 4.3.1., графики справа. Действительная часть тензора диэлектрической функции, полученная после преобразования Крамерса-Кронига мнимой части диэлектрической функции, представлена на рисунке 4.3.1., графики слева. Подстановка рассчитанного ϵ_i в формулу (4.3.1) и взятие интеграла приводят к следующим значениям ϵ_{∞} : 28 для Bi_2Se_3 , 58 для Bi_2Te_3 и 46 для Sb_2Te_3 [59, 60].

Отметим, что для Bi_2Se_3 наши и расчеты из [68] дали одно и то же значение ϵ_{∞} равное приблизительно 28. Значение 95 для ϵ_{∞} , о котором сообщалось ранее [80], является самым высоким из когда-либо наблюдавшихся для Bi_2Te_3 . Вышеупомянутые значения были получено с использованием стандартных методов пропускания и отражения с целью извлечения действительной части диэлектрической функции и получения ϵ_{∞} из подгонки.

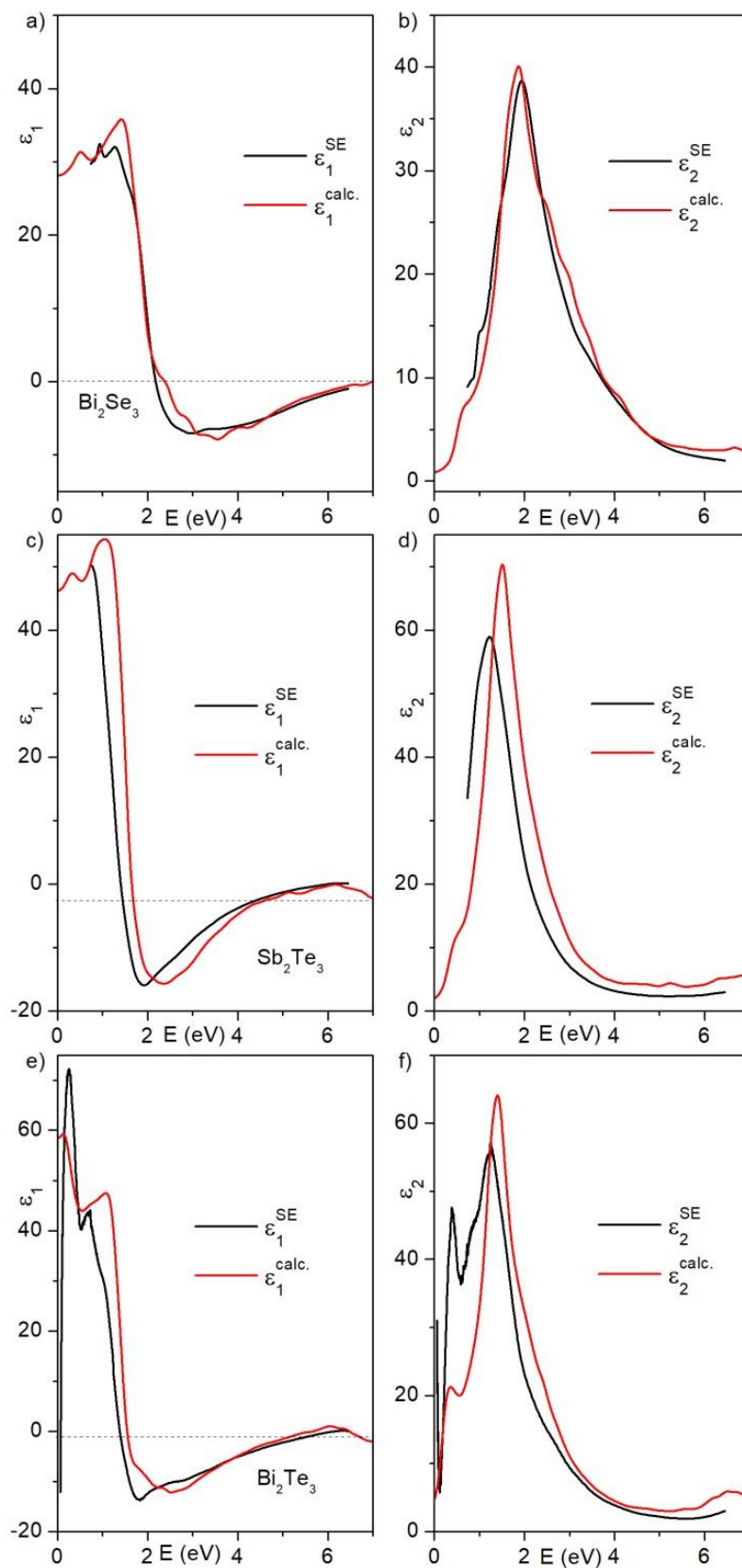


Рисунок 4.3.1. Расчетные и экспериментальные спектры диэлектрической функции для Bi_2Se_3 , Sb_2Te_3 и Bi_2Te_3 : действительная (a,c,e) и мнимая (b,d,f) части, соответственно.

Вычисления запрещённой зоны производится для идеального случая собственного полупроводника, но в действительности изучаемые материалы имеют значительную концентрацию носителей заряда. Которая связана с плазменным возбуждением, и подробнее разбирается в следующей главе. Здесь важно обратить внимание на концентрацию носителей заряда в контексте положения уровня Ферми. Поскольку частота плазменного возбуждения определяется средней концентрацией свободных носителей, распределенных по всем долинам, расположенным ниже либо выше уровня Ферми в материалах с электронным либо дырочным типом проводимости, полученные результаты необходимо рассматривать с учётом положения уровня Ферми относительно дна либо потолка зоны проводимости (валентной зоны) в рассматриваемых материалах.

Хотя изучаемая зонная структура на основе DFT расчётов не совсем правильно воспроизводит ширину запрещенной зоны, но всё же он приемлема для независимого анализа относительного расположения зон в зоне проводимости либо в валентной зоне.

Из сравнения рисунков 4.3.2.(a) и 4.3.2.(b) становится ясным, что многодолинное рассмотрение подходит только для сильно легированного n- Bi_2Se_3 , в то время как умеренные уровни легирования оставят эффективным подход с одной долиной, из-за довольно большого энергетического расщепления между зонами проводимости вблизи запрещенной зоны.

Ситуация с p- Sb_2Te_3 (рис. 4.3.3.(a)) и p- Bi_2Te_3 (рис. 4.3.3.(b)) менее понятна. Тем не менее, согласно рисунку 4.3.3. (a), число валентных зон, участвующих в формировании волны зарядовой плотности (плазмона) в p- Sb_2Te_3 не очень велико по сравнению с p- Bi_2Te_3 (рис. 4.3.3. (b)). Для последнего количество таких долин значительно увеличивается с ростом концентрации носителей заряда, а это означает, что эффективная масса дырок будет отличаться от таковой в случае одной долины. Другими словами, ожидается, что междолинное взаимодействие будет минимальным в n- Bi_2Se_3 , выше в p- Sb_2Te_3 и значительно большим в p- Bi_2Te_3 .

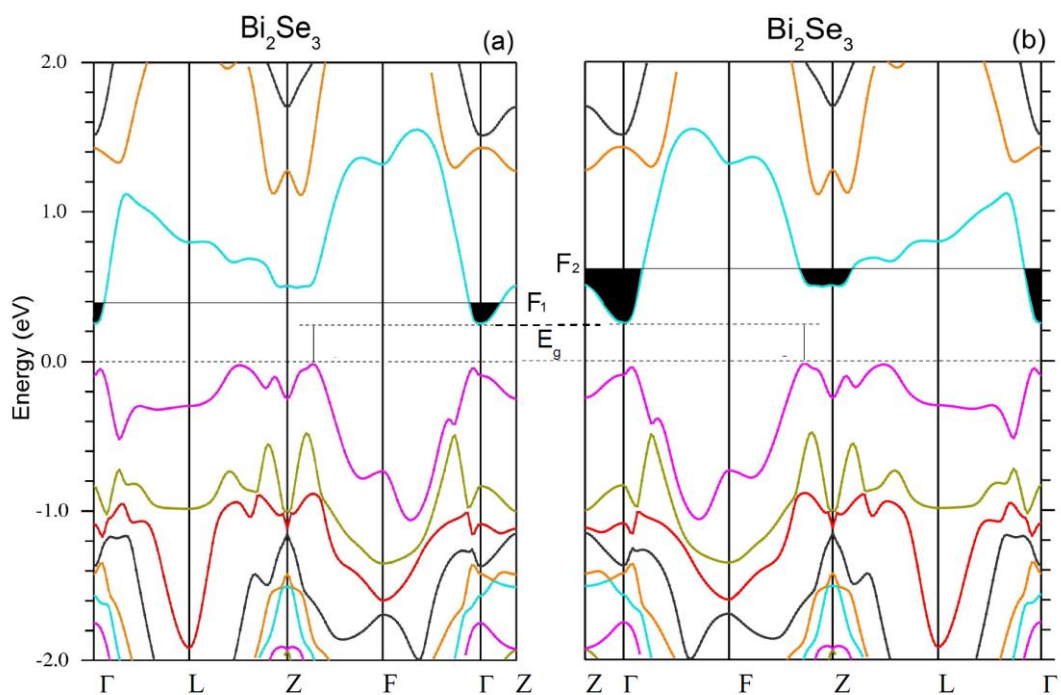


Рисунок 4.3.2. Зонная структура Bi_2Se_3 . Долины (черные области) заполненные электронами, вносящие вклад в плазмонную частоту при умеренном (а) и высоком (б) уровнях легирования.

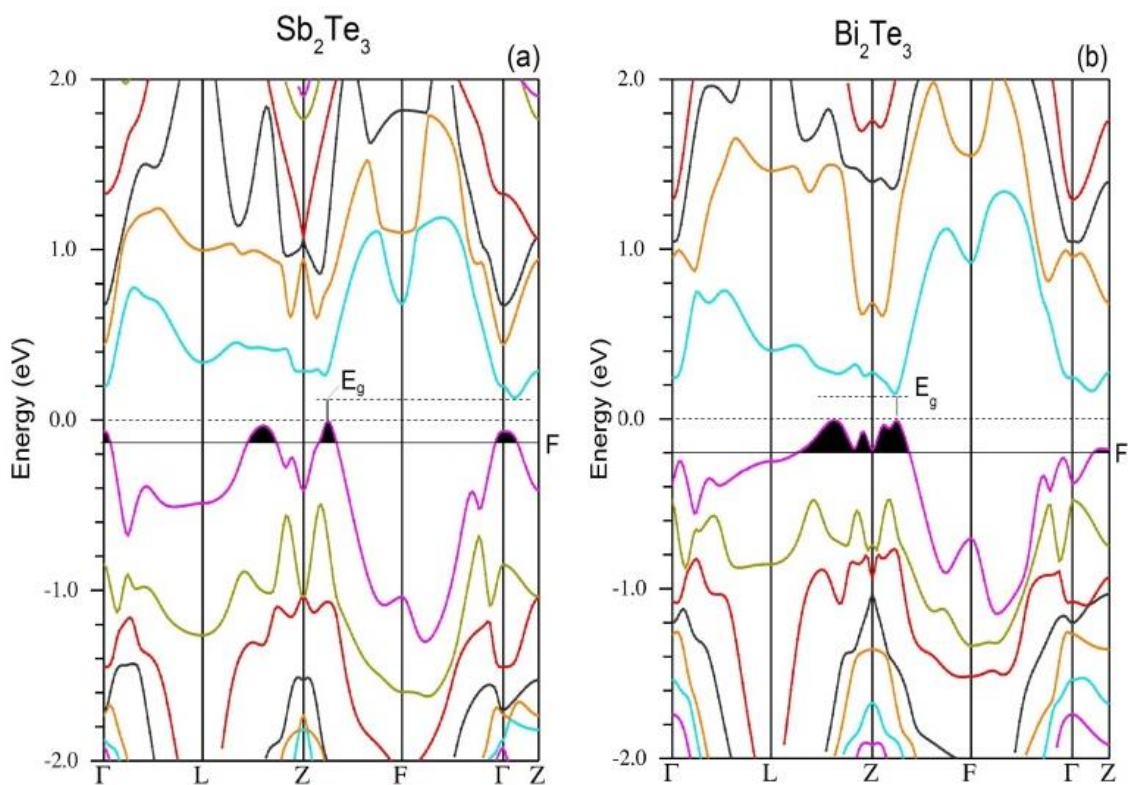


Рисунок 4.3.3. Зонная структура Sb_2Te_3 и Bi_2Te_3 . Долины (черные области) заполненные дырками, вносящие вклад в плазменный край.

Кроме того, полученные значения ϵ_{∞} будут корректны до тех пор, пока будут происходить прямые переходы, и могут не быть корректны в случае непрямых переходов.

4.3.2. Диэлектрическая функция и электронная структура слоистых соединений $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$

Абсолютные значения диэлектрической проницаемости различных соединений типа $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$, полученные из спектроскопической эллипсометрии, представлены на рисунке 4.3.4. вместе с данными для диэлектрической проницаемости классического трехмерного топологического изолятора Bi_2Te_3 . [10, 41]

Сравнение нормированной мнимой части диэлектрических функций на рисунке 4.3.5. показывает, что чем больше n в $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$, тем ближе эта часть к Bi_2Te_3 (рисунок 4.3.5., сплошная кривая). (Обратите внимание, что имеет смысл только сравнение нормализованной мнимой части, которая является функцией формы распределения плотности состояний для оптических переходов.)

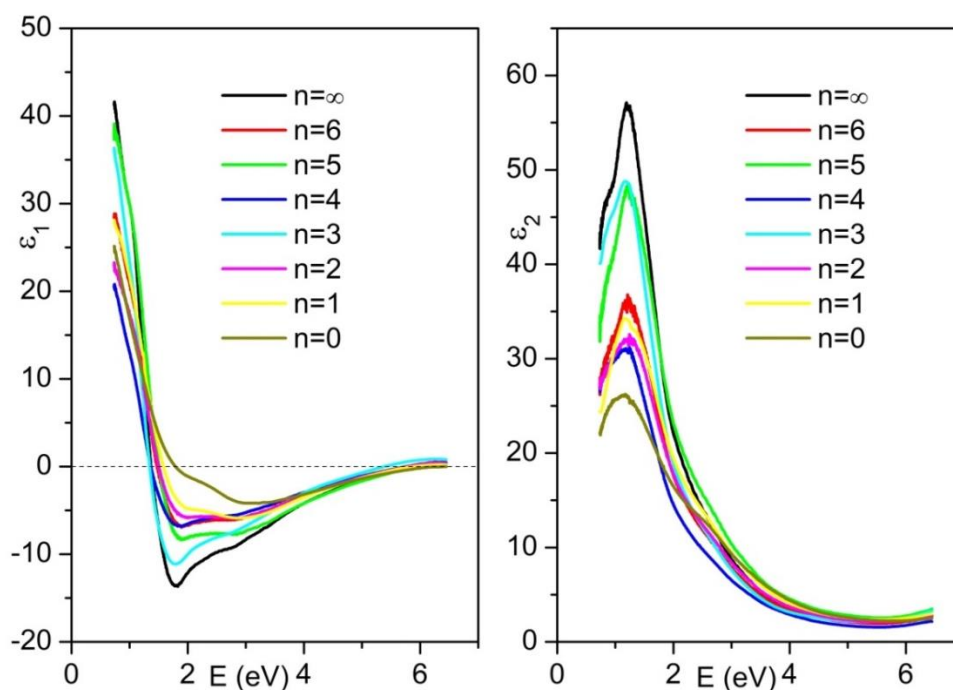


Рисунок 4.3.4. Диэлектрическая функция соединений $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ с $n=0$ (MnBi_2Te_4), $n=1$ (MnBi_4Te_7), $n=2$ ($\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$), $n=3$ ($\text{MnBi}_8\text{Te}_{13}$), $n=4$ ($\text{MnBi}_{10}\text{Te}_{17}$), $n=5$ ($\text{MnBi}_{12}\text{Te}_{19}$), $n=6$ ($\text{MnBi}_{14}\text{Te}_{22}$) и $n=\infty$ (Bi_2Te_3): действительная часть (слева) и мнимая часть (справа).

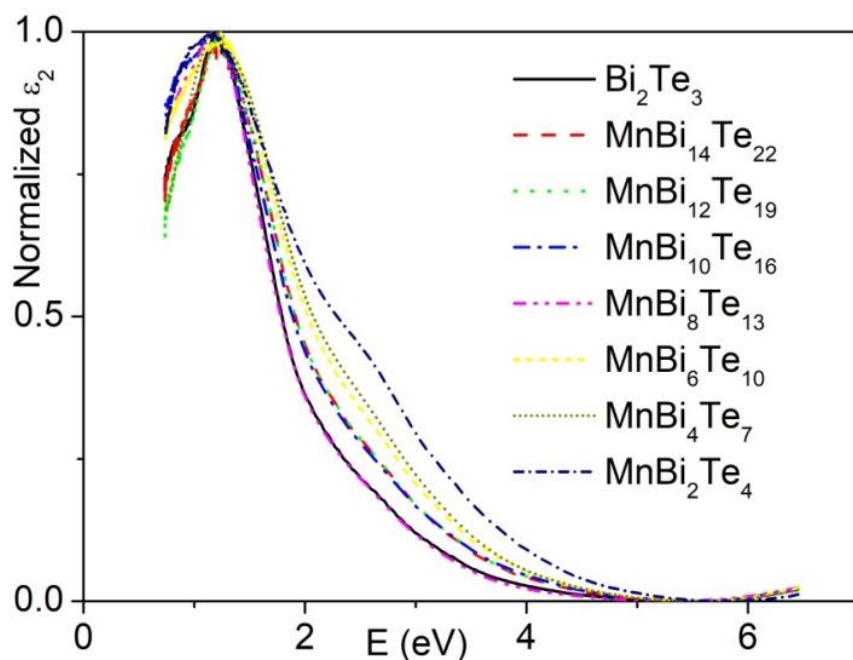


Рисунок 4.3.5. Нормализованная мнимая часть диэлектрической функции соединений $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ полученная из спектроскопической эллипсометрии.

Согласно особенности укладки семислойных и пятислойных пакетов в $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$, увеличение n эквивалентно разбавлению одного семислойного пакета с атомом Mn в растущем объеме без марганцевого пятислойного пакета Bi_2Te_3 . В этом смысле наиболее удаленным от Bi_2Te_3 является MnBi_2Te_4 . Последнее соединение состоит только из семислойных пакетов с марганцем в каждом из них. Остальные представители гомологического ряда соединений $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ содержат как семислойные, так и пятислойные блоки. В конце концов, Bi_2Te_3 содержит только пятислойные блоки, не содержащие атомов Mn.

На рисунке 4.3.6. представлены нормированные мнимые части диэлектрической функции MnBi_2Te_4 , основанной на данных спектроскопической эллипсометрии и рассчитанной. Сравнение показывает, что расчетные данные, полученные с учетом спин-орбитальной связи (SOC) в случае антиферромагнитной фазы (Рисунок 4.3.6.а), чёрная кривая) по сравнению с ферромагнитной (ФМ) фазой (Рисунок 4.3.6.(а), синяя кривая) ближе к данным спектроскопической эллипсометрии (Рисунок 4.3.6.(а), красная кривая). Этот результат коррелирует с тем, что низкотемпературным состоянием MnBi_2Te_4 является АФМ фазой. [69]

Как видно (рисунок 4.3.7.(b)), игнорирование спин-орбитального взаимодействия (SOC) приводит к существенной разнице между результатами, основанными на спектроскопической эллипсометрии и расчетными результатами для антиферромагнитной и ферромагнитной фаз (красная, чёрная и синяя кривые соответственно).

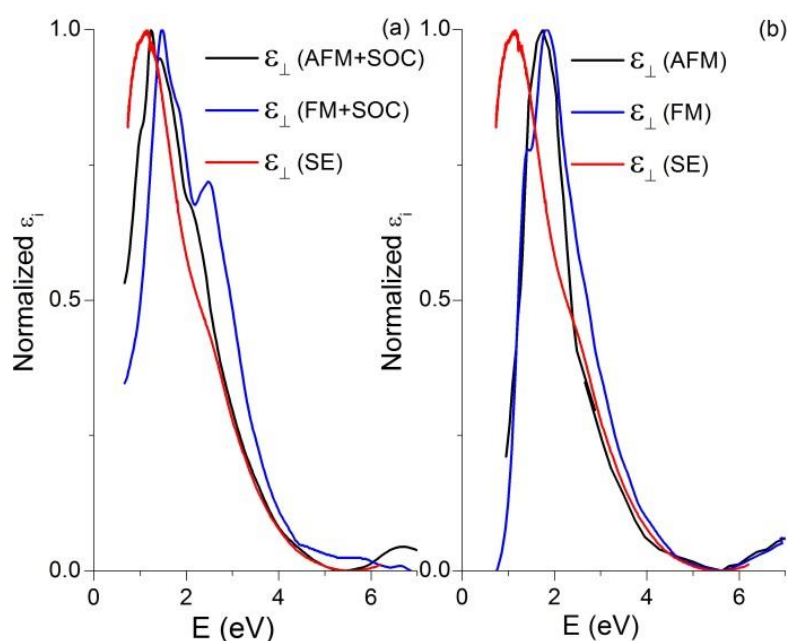


Рисунок 4.3.6. Нормализованная экспериментальная и рассчитанная мнимая часть диэлектрической функции MnBi_2Te_4 . Здесь ϵ_{\perp} соответствует ориентации $\mathbf{E} \perp \mathbf{C}$ электрического вектора (\mathbf{E}) света относительно оптической оси (\mathbf{C}).

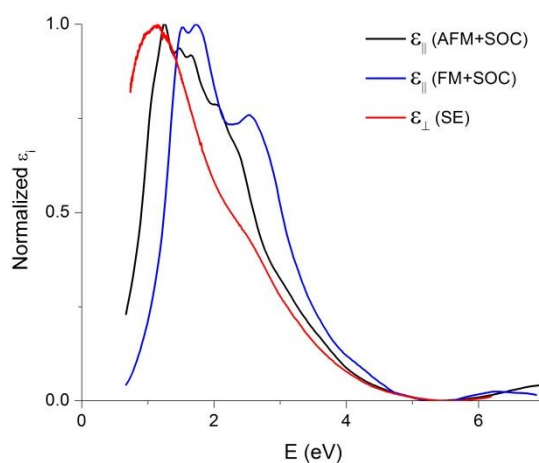


Рисунок 4.3.7. Нормализованная экспериментальная и рассчитанная мнимая часть диэлектрической функции MnBi_2Te_4 . Здесь ϵ_{\parallel} соответствует ориентации $\mathbf{E} \parallel \mathbf{C}$ электрического вектора (\mathbf{E}) света относительно оптической оси (\mathbf{C}).

Представлены нормализованные мнимые части тензора диэлектрической функции (рисунок 4.3.7.), полученные из спектроскопической эллипсометрии (красная кривая) и компонента ϵ_{\parallel} нормализованные мнимые части тензора диэлектрической функции антиферромагнитной и ферромагнитной фаз (чёрная и синяя кривые соответственно). Из сравнения рисунков 4.3.6. (а) и 4.3.7. видно, что даже в случае антиферромагнитной фазы с спин-орбитальным взаимодействием, компонента ϵ_{\parallel} (рисунок 4.3.7., чёрная кривая) заметно отличается от диэлектрической функции на основе измерений спектроскопической эллипсометрии (красные кривые на рисунке 4.3.6.(а) и 4.3.7.). Это согласуется с тем фактом, что диэлектрическая функция из спектроскопической эллипсометрии соответствует перпендикулярной компоненте тензора диэлектрической функции ϵ_{\perp} - MnBi_2Te_4 .

На рисунке выше показана электронная зонная структура, рассчитанная вдоль линий высокой симметрии зоны Бриллюэна с учетом и без учёта спин-орбитального взаимодействия (рисунок 4.3.8.). Без учета спин-орбитального взаимодействия максимум валентной зоны и минимум зоны проводимости расположены в точке Γ , а ширина прямой запрещенной зона составляет 0.5 эВ. Включение спин-орбитального взаимодействия приводит к смещению максимума валентной зоны и минимума зоны проводимости из точки Γ в точку Z , оставляя MnBi_2Te_4 прямозонным полупроводником с щелью запрещенной зоны равной 0.2 эВ.

Расчётные мнимые части перпендикулярной ϵ_{\perp} и параллельной ϵ_{\parallel} компонент тензора диэлектрической функции представлены на рисунке 4.3.9. Каждый из них проявляет четыре особенности, обозначенные как X_1 , X_2 , X_3 и X_4 (рисунок 4.3.9.(а)) и Z_1 , Z_2 , Z_3 и Z_4 (рисунок 4.3.9.(б)), соответственно.

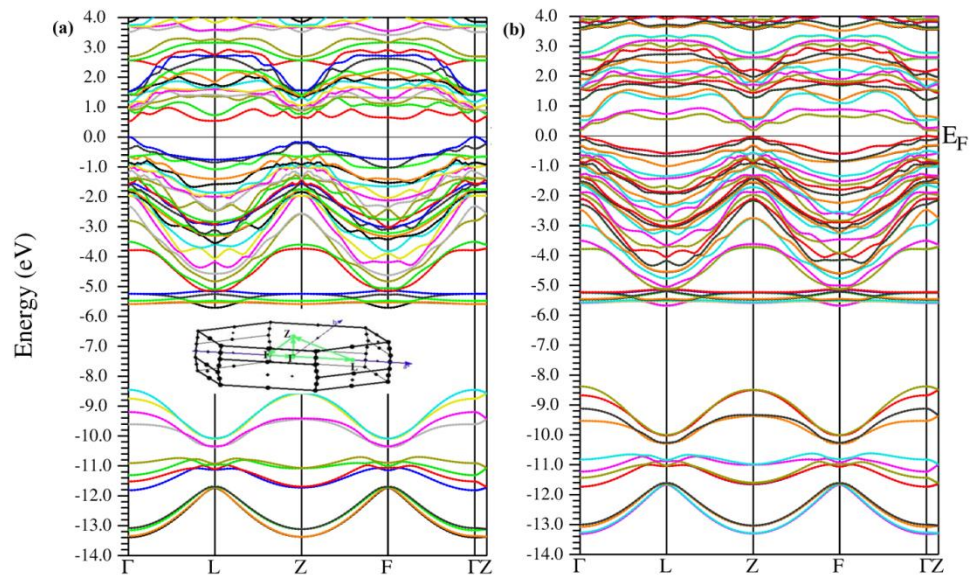


Рисунок 4.3.8. Электронная зонная структура АФМ фазы MnBi_2Te_4 : (а) без спин-орбитального взаимодействия и (б) со спин-орбитальным взаимодействием. На вставке приведена зона Бриллюэна ромбоэдрической решетки.

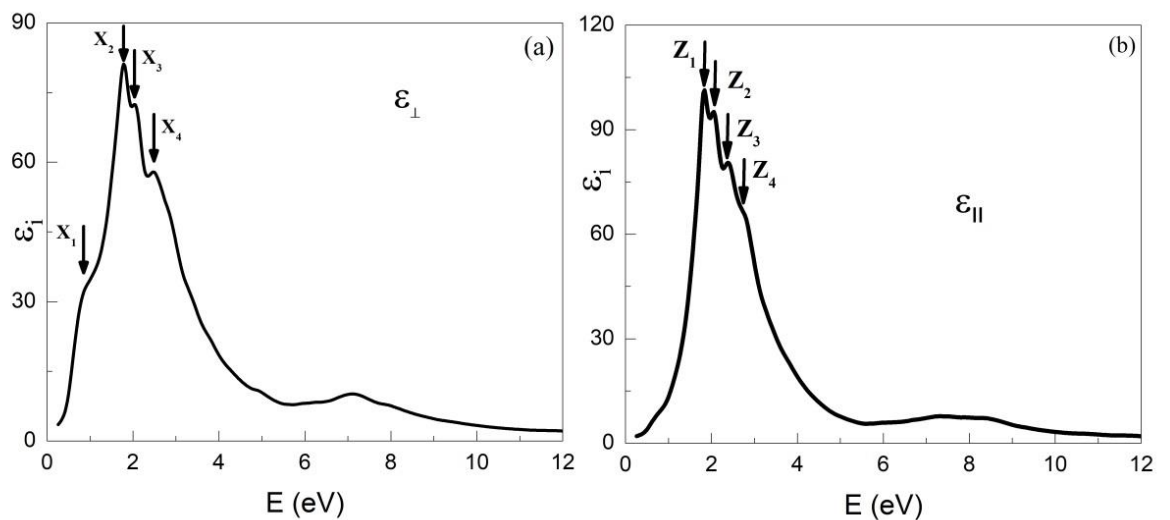


Рисунок 4.3.9. Расчетные мнимые части (ϵ_i) диэлектрической проницаемости MnBi_2Te_4 : (а) ϵ_{\perp} и (б) ϵ_{\parallel} .

В соответствии с полученной зонной структурой принадлежность этих пиков показана на рисунке 4.3.9..

Пики X_2 для ϵ_{\perp} и Z_1 для ϵ_{\parallel} , расположенные около 1,8 эВ, имеют наибольшую амплитуду и в основном обусловлены межзонными оптическими переходами между состояниями Mn 3d + Te 5p → Bi 6p + Te 5p. Структуры X_1 (Z_2), X_3 (Z_3) и X_4 (Z_4) соответствуют переходам Mn 3d + Te 5p → Bi 6p + Te 5p (Te 5p → Mn 3d), Te 5p → Bi 6p (Te 5p → Bi 6p) и Mn 3d + Te 5p → Bi 6p (Te 5p → Mn 3d) соответственно. Для удобства рассмотрения полученные результаты межзонных переходов приведены в таблице 4.3.1.

Сравнение с результатами анализа критических точек с данными из таблицы выше, показывает, что выбранный подход вычисления зонной структуры можно считать достаточно корректным, но при этом полного совпадения не наблюдалось. Так плотность состояний максимальна для спектроскопических данных в энергии 1.57 эВ, а не в 1.8 эВ как из расчета. Таким образом, отклонение составило около 230 мэВ. На рисунке 4.3.10. представлена зонная структура с указанными соответствующими оптическими разрешенными переходами.

Таблица 4.3.1. Межзонные переходы

		E (eV)	PDOS
$\varepsilon_i \perp \mathbf{C}$	X ₁	0.8	Mn 3d+Te 5p→Bi 6p+Te 5p
	X ₂	1.8	Mn 3d+Te 5p→Bi 6p+Te 5p
	X ₃	2.0	Te 5p→Bi 6p
	X ₄	2.5	Mn 3d+Te 5p→Bi 6p
$\varepsilon_i \parallel \mathbf{C}$	Z ₁	1.8	Mn 3d+Te 5p→Bi 6p+Te 5p
	Z ₂	2.0	Te 5p→Bi 6p
	Z ₃	2.5	Te 5p→Mn 3d
	Z ₄	2.8	Te 5p→Mn 3d

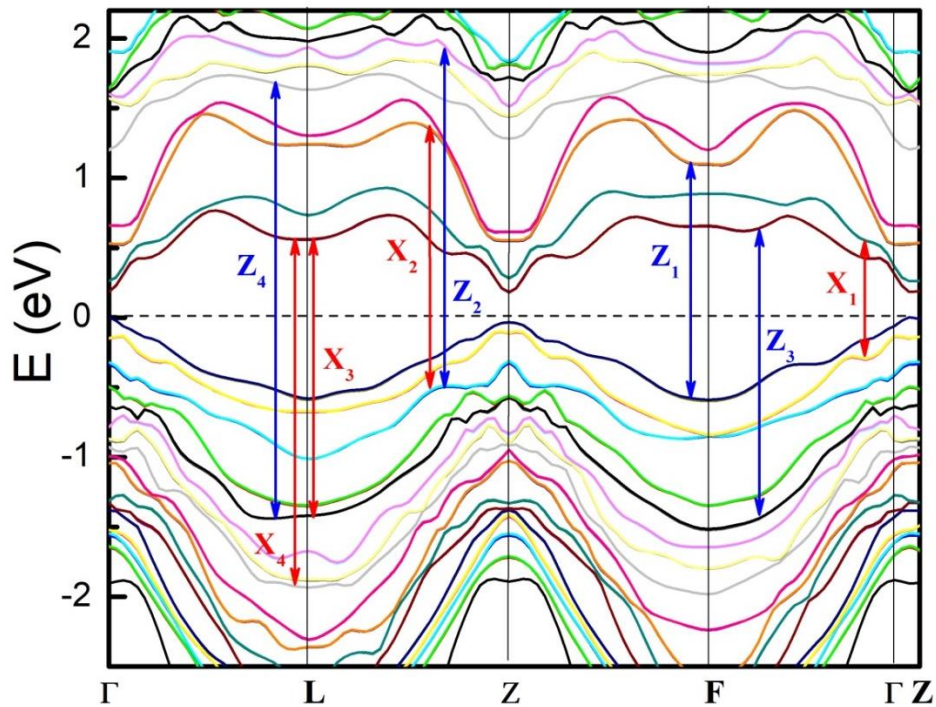


Рисунок 4.3.10. Оптические переходы в MnBi_2Te_4 . Для двух поляризаций мнимой части тензора диэлектрической функции

Диэлектрическая функция слоистых соединений $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$ была получена с помощью спектроскопических измерений и расчетов из первых принципов. Сходство, обнаруженное между основанными на спектроскопической эллипсометрии и расчетными диэлектрическими функциями, позволило соотнести наблюдаемые разрешенные оптические переходы в соответствии с рассчитанной объемной зонной структурой, которая учитывает сильное кулоновское взаимодействие между локализованными 3d-электронами Mn и спин-орбитальное взаимодействие. Рассчитанные полная и парциальная плотности состояний в рамках работы [41] позволяют предположить, что потолок валентной зоны в основном состоит из состояний Mn 3d + Te 5p, а дно зоны проводимости — из Bi 6p + Te 5p с небольшой примесью состояний Mn 3d.

4.3.2. Диэлектрическая функция и электронная структура слоистых соединений $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_{0.5}\text{Te}_4$

DFT рассчитанная зонная структура $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_{0.5}\text{Te}_4$ с учётом спин-орбитального взаимодействия, представлена на рисунке 4.3.11. Эффективная масса электронов и дырок в точке Г в направлении Г-У вдоль слоев, оцененная подгонкой параболы к расчетным зонным структурам (рисунок 4.3.11.) вблизи минимума зоны проводимости и максимума валентной зоны $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_{0.5}\text{Te}_4$. Имеются две зоны проводимости, отсчитывая от дна зоны проводимости с экстремумом в точке Г. Самая нижняя зона проводимости имеет большую кривизну, по сравнению со второй зоной проводимости, следовательно, имеет меньшую эффективную массу $m^* = 0.09m_e$ (для лёгких электронов), чем эффективная масса $m^* = 0.146m_e$ (для тяжёлых электронов) второй зоны проводимости. Эффективная масса дырок для $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_{0.5}\text{Te}_4$ в валентной зоне составляет $m^* = 0.278m_e$ (для лёгких дырок) и $m^* = 0.405m_e$ (для тяжёлых дырок). Ширина непрямой запрещённой зоны равна 0.220 эВ [63].

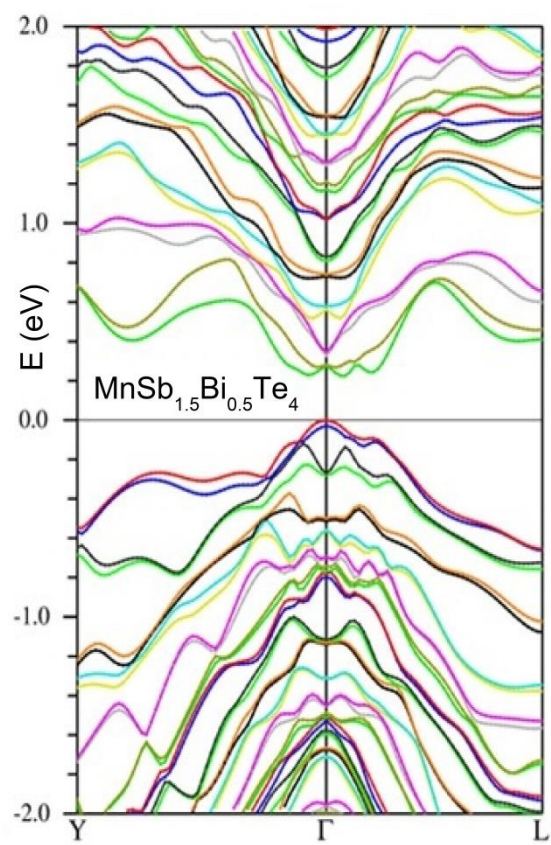


Рисунок 4.3.11. Зонная структура твёрдого раствора $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_{0.5}\text{Te}_4$

4.3.3. Диэлектрическая функция и электронная структура слоистых соединений $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x\text{TeI}$ ($x=0, 0.05$ и 0.1)

Спектроскопическую эллипсометрию применили к слоистым гексагональным твердым растворам BiTeI и $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x\text{TeI}$ с $x=0.05$ и 0.01 . Диэлектрическая функция и коэффициент отражения, полученные при разных углах падения, показывают, что в целом компоненты диэлектрической функции для света, поляризованного перпендикулярно и параллельно нормали (оптической оси C) к слоям, как и ожидалось, различны. Тем не менее, в диапазоне частот, соответствующем внутризонным переходам, поляризованным перпендикулярно C , и межподзонным переходам с той же поляризацией, диэлектрическая функция в хорошем приближении отражает перпендикулярную диагональную компоненту тензора одноосной диэлектрической функции. Это позволяет получать важные параметры электронной структуры исследуемых материалов.

Зависимость диэлектрической функции от энергии фотона, полученная при различных углах падения, представлена на рисунке 4.3.12. с действительной (a, c, e) и мнимой частями (b, d, f) этой функции для BiTeI (a, b), $\text{Bi}_{0.95}\text{Sb}_{0.05}\text{TeI}$ (c, d) и $\text{Bi}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}\text{TeI}$ (e, f) [5,6,62].

Поскольку исследуемые образцы представляют собой монокристаллы BiTeI , $\text{Bi}_{0.95}\text{Sb}_{0.05}\text{TeI}$ и $\text{Bi}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}\text{TeI}$, кристаллизующиеся в гексагональную слоистую структуру [3], они являются одноосными с оптической осью, перпендикулярной плоскости слоя. Соответственно первые две из трех диагональных компонент тензора диэлектрической проницаемости совпадают, а третья может отличаться от этих двух. Диэлектрическая функция, полученная в используемой геометрии измерений (плоскость падающего света перпендикулярна плоскости слоя), обычно (но не всегда) в основном связана с первыми двумя компонентами тензора диэлектрической функции. Самый простой способ проверить это — восстановить диэлектрическую функцию по эллипсометрическим параметрам, полученным при разных углах падения пробирующей электромагнитной волны. Как видно из рисунка 4.3.12., эта

функция, полученная при разных углах падения в широком диапазоне энергий фотонов, в основном одинакова (т.е. не зависит от угла), за исключением интервала энергий от 0.9 до 2.5 эВ. Это указывает на повышенный вклад третьей (поляризованной параллельно оптической оси) компоненты тензора диэлектрической функции в этом диапазоне энергий фотонов. Другая область, в которой эта третья компонента дает очевидный вклад, находится ниже 0.1 эВ. Обведенные кружками части на вставках рисунка 4.3.12. определенно вызваны влиянием этой компоненты.

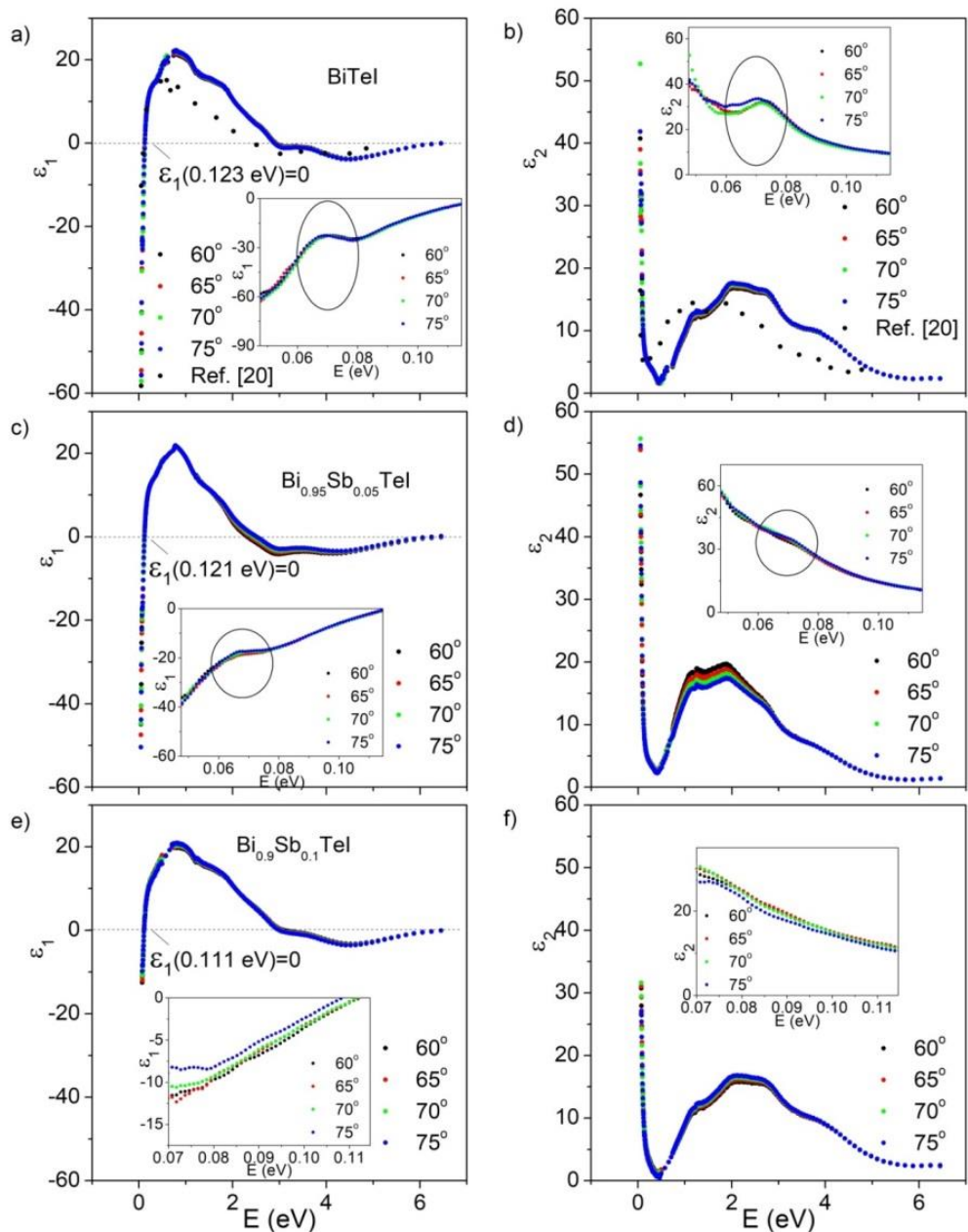


Рисунок 4.3.12. Диэлектрическая функция (действительная часть: а, с, е; мнимая часть: б, д, ф) $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x\text{TeI}$ при $x=0, 0.05$ и 0.1 . Спектроэллипсометрические данные из работы [58] для диэлектрической функции BiTeI ($x=0$) показаны черными кружками. На вставках показаны детали зависимости действительной и мнимой частей диэлектрической функции от энергии фотона ниже 0.1 эВ.

Прямым экспериментальным подтверждением такого вывода являются спектры отражения, представленные на рисунке 4.3.13., измеренные при угле близком к нормальному падению и измерение под углом. В спектре отражения, измеренном при угле близком к нормальному, дополнительных минимумов не наблюдается, а в спектрах отражения, снятых при падении под углом имеется такая особенность. Поскольку эллипсометрические измерения проводятся при достаточно больших углах падения, неизбежен некоторый вклад переходов, поляризованных вдоль оси c . Однако этот вклад исчезает с ростом x . Полученная диэлектрическая функция как раз и отражает этот факт. Обведенная кружком часть на вставках рисунка 4.3.12. ослабевает после перехода от BiTeI к $\text{Bi}_{0.95}\text{Sb}_{0.05}\text{TeI}$ и больше не появляется для $\text{Bi}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}\text{TeI}$.

Отметим, что лучший способ корректно восстановить третью компоненту (a , следовательно, и реальную оптическую анизотропию одноосного материала) — провести эллипсометрические измерения на поверхности, содержащей оптическую ось. Однако подготовка поверхности для Ван дер Ваальсового материала чрезвычайно сложна и выходит за рамки настоящей диссертации.

Тем не менее, в хорошем приближении полученная диэлектрическая функция в диапазоне энергий фотонов от 0.1 до 0.9 эВ представляет собой компоненты тензора диэлектрической функции, поляризованные перпендикулярно оптической оси.

Общепринятая модель расположения зон и оптических переходов (кроме внутризонных) в запрещенной зоне BiTeI представлена на рисунке 4.3.13.. Эту модель целесообразным будет принять и для $\text{Bi}_{0.95}\text{Sb}_{0.05}\text{TeI}$ и $\text{Bi}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}\text{TeI}$.

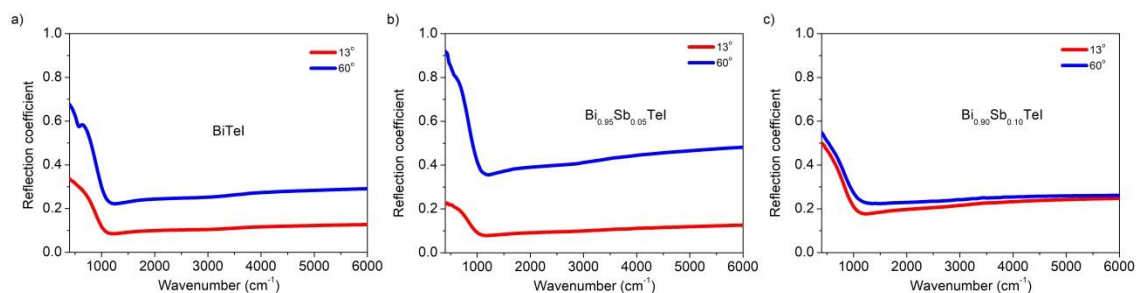


Рисунок 4.3.12. Коэффициент отражения при падении близкому к нормальному углу (красные линии) и падении под углом (синие линии) в зависимости от волнового числа для BiTeI (a), $\text{Bi}_{0.95}\text{Sb}_{0.05}\text{TeI}$ (b) и $\text{Bi}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}\text{TeI}$ (c).

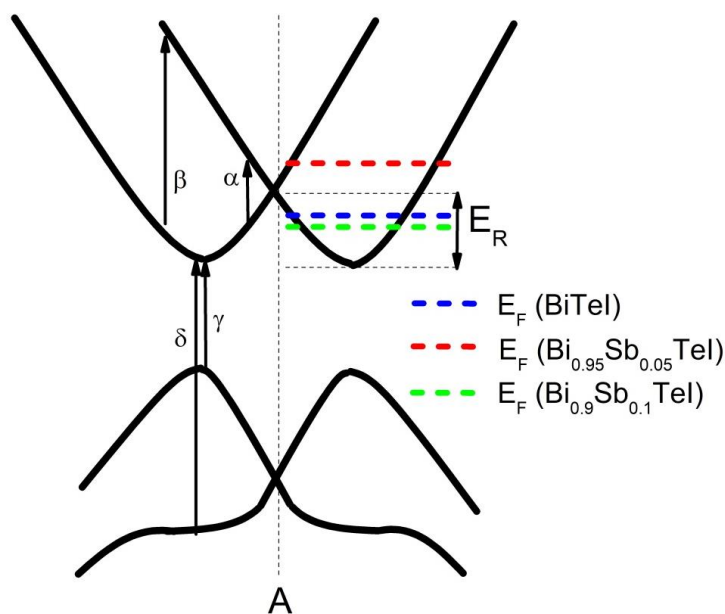


Рисунок 4.3.13. Оптические переходы в запрещенной зоне BiTeI . Пунктирные линии синего, красного и зеленого цветов показывают положение уровня Ферми в BiTeI , $\text{Bi}_{0.95}\text{Sb}_{0.05}\text{TeI}$ и $\text{Bi}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}\text{TeI}$ соответственно.

Согласно работе [53], уровень Ферми (E_F) в BiTeI расположен ниже энергии Рашбы E_R на рисунке 4.3.13. для плотностей носителей менее $4 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$ и для более высоких плотностей выше энергии E_R . По этой причине уровень Ферми в BiTeI с концентрацией носителей $3.3 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$ (таблица 1) ниже E_R на рисунке 4.3.13. (синия пунктирная линия), а в исследованном $\text{Bi}_{0.95}\text{Sb}_{0.05}\text{TeI}$ с концентрацией $N > 6.25 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$ (таблица 1) выше (красная пунктирная линия на рисунке 4.3.13.) и в $\text{Bi}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}\text{TeI}$ с концентрацией $N = 2.85 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$ (таблица 1) ниже (зеленая пунктирная линия на рисунке 4.3.13.) энергии E_R , соответственно.

При конечной температуре сдвиг Бурштейна-Мосса (ΔVM) для прямого полупроводника n-типа обычно принимается как [43]

$$\Delta VM = E_{opt} - E_g = (1 + m_e/m_h)(E_F - 4k_B T) \quad (4.3.1)$$

Здесь E_{opt} — измеренная ширина оптической запрещенной зоны, E_g — энергия запрещенной зоны, m_e/m_h — отношение эффективных масс электронов и дырок, E_F — положение уровня Ферми относительно дна зоны проводимости, k_B и T — постоянная Больцмана и температура, соответственно.

Необходимо обратить внимание, на то, что при конечной температуре уровень Ферми больше не разделяет полностью занятые и пустые состояния, а электронные состояния, расположенные в пределах $4k_B T$ ниже уровня Ферми E_F , уже частично пусты. В частности, при комнатной температуре $4k_B T$ (104 мэВ) уже соизмеримо с E_R (~100 мэВ [40]). Для простоты на рисунке 4.3.13. не показана ΔVM , охватывающая части как зоны проводимости, так и валентной зоны, которую легко представить, используя положение уровней Ферми в правой части рисунка 4.3.13.. По той же причине оптические переходы в левой части рисунка 4.3.13. нарисованы так, чтобы показать только электронные зоны, между которыми они происходят. Более важными для дальнейших рассуждений являются следующие моменты.

Оптические переходы на рисунке 4.3.13. происходят с ростом энергии фотонов в порядке α , β , γ и δ , где α и β — межподзонные переходы между

Рашба-расщепленными ветвями зоны проводимости, γ -переходы — межзонные переходы на щелевой (~ 380 мэВ [40]) и δ -переходы — межзонные переходы (~ 600 мэВ [53]), возбуждаемые с нижней Рашба расщепленными ветвями валентной зоны.

Энергия α - или β -переходов определяется величиной E_R . Они возникают между одними и теми же Рашба расщепленными ветвями зоны проводимости и отличаются друг от друга только разной дисперсией вовлеченных электронных состояний. Эта дисперсия противоположна для начального и конечного электронных состояний, участвующих в α -переходах, и одинакова для таких состояний в случае β -переходов. Хотя последние переходы происходят при несколько более высокой энергии, чем α -переходы (рисунок 4.3.13.), при комнатной температуре трудно отличить один тип перехода от другого. В мнимой части (рисунок 4.3.14., красные линии) диэлектрической функции, уточненной по вкладу Друде (т. е. по внутрizonным переходам), они проявляются в виде широкого пика в диапазоне энергий фотонов от 0.1 до 0.4 эВ с центрами около 0.225, 0.227 и 0.211 эВ для BiTeI , $\text{Bi}_{0.95}\text{Sb}_{0.05}\text{TeI}$ и $\text{Bi}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}\text{TeI}$ соответственно. Вставки на рисунке 4.3.14. иллюстрируют тот факт, что зависимость от энергии фотона $[(\epsilon_2)^2 E^4]/n^2 \sim \alpha^2 E^2 \sim E - E_0$ для прямых разрешенных индекс точно следует линейному закону с E_0 , равным 0.173 и 0.153 эВ для BiTeI , $\text{Bi}_{0.95}\text{Sb}_{0.05}\text{TeI}$ и $\text{Bi}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}\text{TeI}$ соответственно. Другими словами, начало межподзонных переходов в $\text{Bi}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}\text{TeI}$ меньше на 20 мэВ по сравнению с BiTeI .

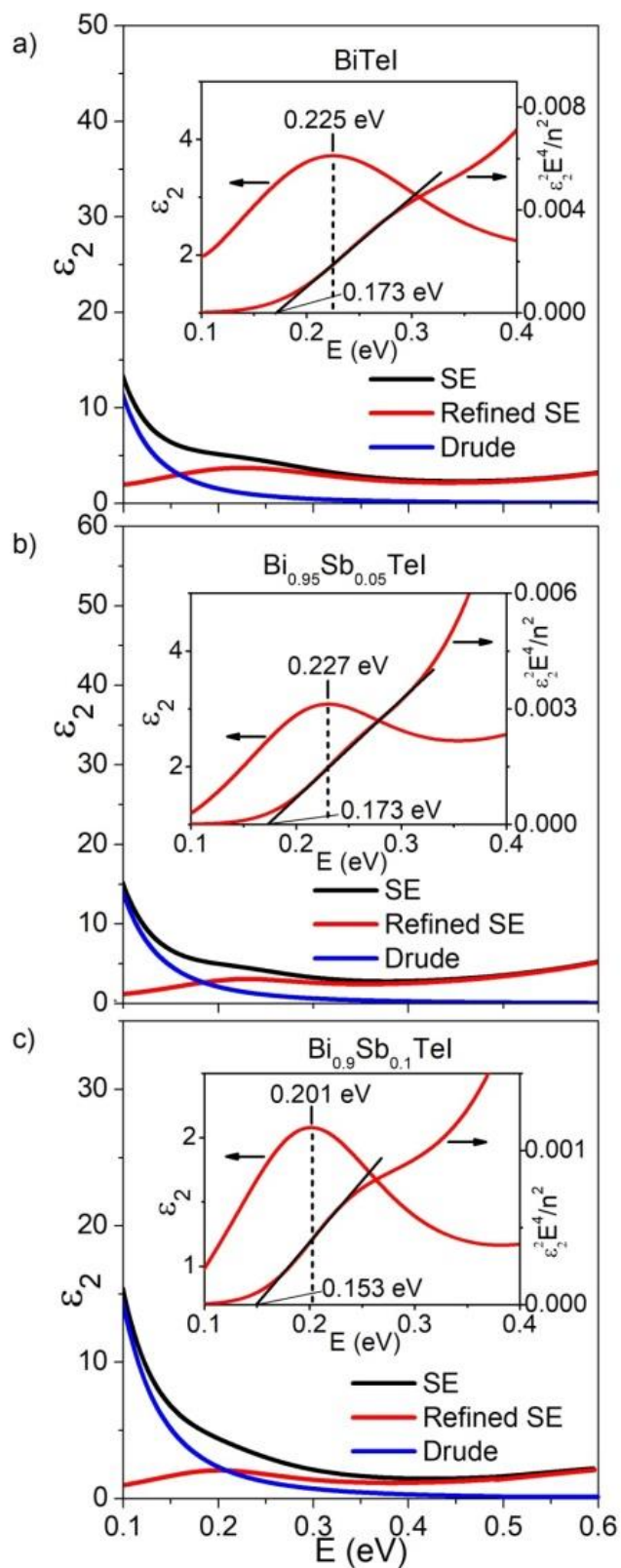


Рисунок 4.3.14. Мнимая часть диэлектрической функции (черные линии), вклад Друде (синие линии) и уточненная по вкладу Друде мнимая часть диэлектрической функции (красные линии) для BiTeI (a), Bi_{0.95}Sb_{0.05}TeI (b) и Bi_{0.9}Sb_{0.1}TeI (c).

Это ожидаемый результат, поскольку Sb легче Bi и должен вызывать меньшее спиновое расщепление. В то же время не удивителен незначительный эффект от аналогичной замены Bi на Sb в соединение $\text{Bi}_{0.95}\text{Sb}_{0.05}\text{TeI}$. Концентрация свободных носителей в $\text{Bi}_{0.95}\text{Sb}_{0.05}\text{TeI}$ заметно выше по сравнению с BiTeI и $\text{Bi}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}\text{TeI}$, а уровень Ферми выше энергии E_R . Это означает, что межподзонные переходы преимущественно β -типа, а не α -типа. Высокая концентрация свободных носителей заряда [31] и возможное отклонение от параболичности расщепленных уровней Рашбы при больших импульсах вдали от точки A зоны Бриллюэна могли быть причиной полученного большого значения эффективной массы электрона в соединении $\text{Bi}_{0.95}\text{Sb}_{0.05}\text{TeI}$.

Из-за специфики и сложности электронной зонной структуры и анизотропии диэлектрической функции, моделирование эллипсометрических данных, в будущей перспективе, требует применить модельные функции, полученные из вычислений первых принципов, подобные тем, которые были сделаны ранее в [53,78] для интерпретации оптической проводимости BiTeI .

ВЫВОДЫ

1. Получены эллипсометрические параметры образцов узкозонных частично вырожденных полупроводников Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 , MnBi_2Te_4 , $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$, $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_{0.5}\text{Te}_4$ и $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x\text{TeI}$ в инфракрасном диапазоне спектра электромагнитных волн $\sim 400 - 5600 \text{ см}^{-1}$.
2. Построена оптическая модель для Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 , MnBi_2Te_4 , $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$, $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_{0.5}\text{Te}_4$ и $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x\text{TeI}$, которая в рамках осциллятора Друде с высокой точностью описывает эллипсометрические параметры.
3. Восстановлена диэлектрическая функция для Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 , MnBi_2Te_4 , $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$, $\text{MnSb}_{1.5}\text{Bi}_{0.5}\text{Te}_4$ и $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x\text{TeI}$ и определены подвижность и транспортная эффективная масса носителей заряда.
4. Показана, что точность значений концентрации носителей заряда, определённых из измерений эффекта Холла может быть улучшена путём оптимизации эллипсометрических данных в области поглощения на свободных носителях.
5. Определены параметры внутрizonных и межзонных переходов в MnBi_2Te_4 . Оценена ширина объёмной запрещенной зоны 0.212 эВ при комнатной температуре, которая близка к теоретическому значению 0.200 эВ этой величины.
6. Обнаружено наличие двух подзон зоны проводимости в антиферромагнитном MnBi_2Te_4 с сильно различающимися эффективными массами $0.12m_e$ и $3m_e$, и связанная с этим аномальная температурная зависимость экранированной плазменной частоты. Построена теоретическая модель этой зависимости.
7. Получены спектроэллипсометрические параметры гексагональных твердых растворов BiTeI и $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x\text{TeI}$ с $x = 0.05$ и 0.1 . Показано, что смещение максимума мнимой части диэлектрической функции в области межподзонных переходов в зоне проводимости при частичной замене Bi на Sb с изменением состава x твёрдого раствора $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x\text{TeI}$ связано с

уменьшением величины спин-орбитального взаимодействия при замене
Bi на более лёгкий Sb.

СПИСОК УСЛОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ И СОКРАЩЁННЫХ СЛОВ

ТИ – топологический изолятор

ДФ – диэлектрическая функция

2D – двухмерная структура

3D – трёхмерная структура

E_n – энергетический уровень

k_B – постоянная Больцмана

T – температура

E_F – энергия уровня ферми относительно дна (потолка) зоны проводимости (валентной зоны)

τ – время релаксации

μ – подвижность носителей заряда

m^* – эффективная масса

m_e – масса электрона

e – заряд электрона

\hbar – постоянная Планка

DFT – теория функционала плотности

ЛО-ТО – расщепление продольных и поперечных фононов

E_g – ширина запрещённой энергии

ω_p – плазменная частота

E – электрическая напряжённость

B – магнитная индукция

j – плотность тока

D – электрическая индукция

H – вектор магнитной напряжённости

ϵ_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума

ϵ – диэлектрическая функция среды

ϵ_{ij} – тензор диэлектрической функции

μ_0 – магнитная проницаемость вакуума

μ – магнитная проницаемость среды
 n – показатель преломления
 N – комплексный показатель преломления
 k – коэффициент экстинкции
 k – волновое число
 ε_1 – действительная часть диэлектрической функции
 ε_2 – мнимая часть диэлектрической функции
 F – сила осциллятора
 ω – циклическая частота
 \vec{S} – вектор Пойнтинга
 I – интенсивность
 R – коэффициент отражения
 S_0, S_1, S_2 и S_3 – параметры Стокса
 ψ и Δ – эллипсометрические углы (эллипсометрические параметры)
 ε_{\perp} и ε_{\parallel} – перпендикулярная и параллельная компонента диэлектрической функции
 C – оптическая ось
ППП – поверхностный плазмон поляритон
ППР – поверхностный плазмонный резонанс
СВ – зона проводимости
VB – валентная зона
 φ – фаза

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Abdullaev, N.A., Lattice Dynamics of Bi₂Te₃ and Vibrational Modes in Raman Scattering of Topological Insulators MnBi₂Te₄·n(Bi₂Te₃) / I.R. Amiraslanov, Z.S. Aliev, Z.A. Jahangirli, I.Yu. Sklyadneva, E.G. Alizade, Y.N. Aliyeva, M.M. Otrokov, V.N. Zverev, N.T. Mamedov, E.V. Chulkov // *Jetp Lett.* – 2022, - 115, - 749–756
2. Adachi, S. Optical Properties of Crystalline and Amorphous Semiconductors: Materials and Fundamental Principles // – Springer Science, –1999. – 271 p. – p.120–124.
3. Ahmadov, E.J. Phase equilibria of the Sb₂Te₃+2BiI₃↔Bi₂Te₃+2SbI₃ reciprocal system: synthesis and characterization of the cation-substituted Bi_{1+x}Sb_xTeI solid solutions / E.N. Orujlu, D.M. Babanly, D.A. Mammadov, E.H. Alizade, I. A. Mamedova, N.A. Abdullayev, N.T. Mamedov, M.B. Babanly // *J. Alloys Compd.*, -2022, -929 (1–11), -167388.
4. Aliev, Z. S. Novel ternary layered manganese bismuth tellurides of the MnTe-Bi₂Te₃ system: Synthesis and crystal structure / I. R. Amiraslanov, D. I. Nasonova, A. V. Shevelkov, N. A. Abdullayev, Z. A. Jahangirli, E. N. Orujlu, M. M. Otrokov, N. T. Mamedov, M. B. Babanly, E. V. Chulkov // *J. Alloys Compd.*, -2019, -789, -443.
5. Aliev, Z. S. The Bi₂Se₃–Bi₂Te₃–BiI₃ system: Synthesis and characterization of the BiTe_{1-x}Se_xI solid solutions / E. C. Ahmadov, D. M. Babanly, I. R. Amiraslanov, M. B. Babanly // *Calphad*, -2019, -66, -101650.
6. Aliev, Z.S. Spectroscopic Ellipsometry and Raman Spectroscopy of Bi_{1-x}Sb_xTeI Solid Solutions with x≤0.1 / E.H. Alizade, S.S. Ragimov, N.A. Abdullayev, N.T. Mamedov // *ICSE-9 Abstract Book*, - 2022, - Beijing, - 194
7. Aliev, Z.S. Spectroscopic Ellipsometry and Raman Spectroscopy of Bi_{1-x}Sb_xTeI Solid Solutions with x≤0.1 / E.H. Alizade, D.A. Mammadov, J.N. Jalilli, Y.N. Aliyeva, N.A. Abdullayev, S.S. Ragimov, S.M. Bagirova, Z.

- Jahangirli, N.T. Mamedov, E.V. Chulkov // *Thin Solid Films*, - 2023, - 768, -139727
8. Alizade, E. Plasmonic behaviors OF $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$, IN ultraviolet (UV) ranges// *AJP FIZIKA*, - M.H. Shahtakhtinski, -25-26, 2022
 9. Alizade, E. Surface plasmon polariton observation at narrow-gap semiconductor Bi_2Se_3 and Sb_2Te_3 // *AJP FIZIKA*, - XXVII (2), -38-40, 2021
 10. Alizade, E.H. Electronic structure and dielectric function of Mn-Bi-Te layered compounds / S.N. Mammadov, Z.A. Jahangirli, M.M. Otrokov, Z.S. Aliev, I.R. Amiraslanov, M.B. Babanly, N.T. Mamedov, A.M. Shikin, E.V. Chulkov // *ICSE-8 Abstract Book*, - Barselona, -2019, - 188
 11. Amiraslanov, I. R. Crystal structure and Raman-active lattice vibrations of magnetic topological insulators $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$, ($n=0, 1, \dots, 6$) / Z. S. Aliev, P. A. Askerova, E. H. Alizade, Y. N. Aliyeva, N. A. Abdullayev, Z. A. Jahangirli, M. M. Otrokov, N. T. Mamedov, and E. V. Chulkov // *Phys. Rev. B*, -2022, -106, -184108
 12. Ando, Y. J. Topological Insulator Materials // *Phys. Soc. Jpn.*, – 2013, 82 (10), – p. 102001/1-36.
 13. Barnes W. L. Surface plasmon–polariton length scales: a route to sub-wavelength optics // *J. Opt. A: Pure Appl. Opt.*, -2006, -8, -S87 .
 14. Bernevig, B. A. Topological Insulators and Topological Superconductors / T.L. Hughes // Princeton University Press, -2013, -264
 15. Berry, H. G. Measurement of the Stokes parameters of light / G. Gabrielse, and A. E. Livingston // *Appl. Opt.*, -1977, -16, -3200-3205
 16. Berry, M. V. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes // *Proceedings of the Royal Society of London*, -1984, -392(1802), -45–57
 17. Bing, Xu. Infrared study of the multiband low-energy excitations of the topological antiferromagnet MnBi_2Te_4 / Y. Zhang, E. H. Alizade, Z. A. Jahangirli, F. Lyzwa, E. Sheveleva, P. Marsik, Y. K. Li, Y. G. Yao, Z. W. Wang, B. Shen, Y. M. Dai, V. Kataev, M. M. Otrokov, E. V. Chulkov, N. T.

- Mamedov, & Christian Bernhard. // *Physical Review B*, - 2020, -103(12), - L121103
18. Blaha, P. WIEN2k: An Augmented Plane Waves Plus Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties / K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka, and J. Luitz // -Vienna, -Vienna University of Technology, - 2008.
 19. Bychkov, Yu.A. Properties of a 2D electron gas with lifted spectral degeneracy / E.I. Rashba // *JETP Lett.*, -1984, -39, -79–81.
 20. Caviglia, A.D. Tunable Rashba spin-orbit Interaction at oxide interfaces / M. Gabay, S. Gariglio, N. Reyren, C. Cancellieri, J.-M. Triscone // *PRL*, -2010, -104, -126803, -1–4.
 21. Chen, Y. L. Experimental realization of a three-dimensional topological insulator, Bi₂Te₃ / J. G. Analytis, J.-H. Chu, Z. K. Liu, S.-K. Mo, X. L. Qi, H. J. Zhang, D. H. Lu, X. Dai, Z. Fang, S. C. Zhang, I. R. Fisher, Z. Hussain, And Z.-X. Shen // *Science*, -2009, -325, -178–181.
 22. Chen, Y. J. Topological Electronic Structure and Its Temperature Evolution in Antiferromagnetic Topological Insulator MnBi₂Te₄ / L. X. Xu, J. H. Li, Y. W. Li, H. Y. Wang, C. F. Zhang, H. Li, Y. Wu, A. J. Liang, C. Chen, S. W. Jung, C. Cacho, Y. H. Mao, S. Liu, M. X. Wang, Y. F. Guo, Y. Xu, Z. K. Liu, L. X. Yang, Y. L. Chen // *Phys. Rev. X*, -2019, -9, -041040
 23. Chis, V. Vibrations in binary and ternary topological insulators: First-principles calculations and Raman spectroscopy measurements / I. Yu. Sklyadneva, K. A. Kokh, V. A. Volodin, O. E. Tereshchenko, and E. V. Chulkov // *Phys. Rev. B*, -2012, -86, -174304.
 24. Cho, Yu. Phonon modes and Raman signatures of MnBi_{2n}Te_{3n+1} (n = 1,2,3,4) magnetic topological heterostructures / J. H. Kang, L. Liang, M. Taylor, X. Kong, S. Ghosh, F. Kargar, Ch. Hu, A. A. Balandin, A. A. Puretzky, N. Ni, Ch. W. Wong // *Phys. Rev. Res.*, -2020, -4, -013108.
 25. Choe, J. Electron-phonon and spin-lattice coupling in atomically thin layers of MnBi₂Te₄ / D. Lujan, M. Rodriguez-Vega, Z. Ye, A. Leonardo, J. Quan,

- T. N. Nunley, L-J. Chang, S.-F. Lee, J. Yan, G. A. Fiete, R. He, and X. Li // Nano Lett., -2021, -21, -6139.
26. Cui, J. Transport properties of thin flakes of the antiferromagnetic topological insulator MnBi_2Te_4 / M. Shi, H. Wang, F. Yu, T. Wu, X. Luo, J. Ying, and X. Chen // Phys. Rev. B, -2019, -99, -155125.
27. Di Pietro, P. Optical conductivity of bismuth-based topological insulators / F. M. Vitucci, D. Nicoletti, L. Baldassarre, P. Calvani, R. Cava, Y. S. Hor, U. Schade, and S. Lupi // Phys. Rev. B, -2012, -86, -045439.
28. Ding, L. Crystal and magnetic structures of magnetic topological insulators MnBi_2Te_4 and MnBi_4Te_7 / Ch. Hu, F. Ye, E. Feng, N. Ni, H. Cao, Phys. // Rev. B, -2020, -101, -020412(R).
29. Dordevic, S. V. Signatures of charge inhomogeneities in the infrared spectra of topological insulators Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 and Sb_2Te_3 / M. S. Wolf, N. Stojilovic, H. Lei, and C. Petrovic // J. Phys.: Condens. Matter, -2013, -25, -075501.
30. Ereemeev, S.V. Giant Rashba-type spin splitting at polar surfaces of BiTeI / I.A. Nechaev, E.V. Chulkov // JETP Lett., -2012, -96, -437–444.
31. Fujiwara, H. Effects of carrier concentration on the dielectric function of ZnO:Ga and $\text{In}_2\text{O}_3:\text{Sn}$ studied by spectroscopic ellipsometry: analysis of free-carrier and band-edge absorption / M. Kondo // Phys. Rev. B, -2005, -71, -075109, -1–10.
32. Fujiwara, H. Spectroscopic Ellipsometry: Principles and Applications // West Sussex, John Wiley & Sons Ltd., – 2007. – 388 p.
33. Grundler, D. Large Rashba splitting in InAs quantum wells due to electron wave function penetration into the barrier layers // PRL, -2000, -84, -6074–6077.
34. Hao, Yu-Jie. Gapless Surface Dirac Cone in Antiferromagnetic Topological Insulator MnBi_2Te_4 / Pengfei Liu, Yue Feng, Xiao-Ming Ma, E.F. Schwier, Masashi Arita, Shiv Kumar, Chaowei Hu, Rui'e Lu, Meng Zeng, Yuan Wang, Zhanyang Hao, Hong-Yi Sun, Ke Zhang, Jiawei Mei, Ni Ni, Liusuo

- Wu, Kenya Shimada, Chaoyu Chen, Qihang Liu, and Chang Liu // *Phys. Rev. X*, -2019, -9, -041038
35. Hasan, M. Z. Colloquium: Topological insulators / C. L. Kane // *Reviews of Modern Physics*, -2010, -82(4), -3045–3067.
36. Heid, R. Electron-phonon coupling in topological surface states: The role of polar optical modes / I.Y. Sklyadneva, E.V. Chulkov // *Sci Rep*, -2017, -7, -1095.
37. Heremans, J. Tetradymites as thermoelectrics and topological insulators / R. Cava, and N. Samarth // *Nat. Rev. Mater.*, -2017, -2, -17049.
38. Xia, Y. Observation of a large-gap topological-insulator class with a single Dirac cone on the surface / D. Qian, D. Hsieh, et al. // *Nature Phys*, -2009, -5, -398–402.
39. Xu, B. Infrared study of the multiband low-energy excitations of the topological antiferromagnet MnBi_2Te_4 / Y. Zhang, E. H. Alizade, Z. A. Jahangirli, F. Lyzwa, E. Sheveleva, P. Marsik, Y. K. Li, Y. G. Yao, Z. W. Wang, B. Shen, Y. M. Dai, V. Kataev, M. M. Otrokov, E. V. Chulkov, N. T. Mamedov, and C. Bernhard // *Phys. Rev. B*, -2021, -103, -L121103.
40. Ishizaka, K. Giant Rashba-type spin splitting in bulk BiTeI / M.S. Bahramy, H. Murakawa, M. Sakano, T. Shimojima, T. Sonobe, K. Koizumi, S. Shin, H. Miyahara, A. Kimura, K. Miyamoto, T. Okuda, H. Namatame, M. Taniguchi, R. Arita, N. Nagaosa, K. Kobayashi, Y. Murakami, R. Kumai, Y. Kaneko, Y. Onose, Y. Tokura // *Nat. Mater.*, -2011, -10, -521–526.
41. Jahangirli, Z. A. Electronic structure and dielectric function of Mn-Bi-Te layered compounds / E. H. Alizade, Z. S. Aliev, M. M. Otrokov, N. A. Ismayilova, S. N. Mammadov, I. R. Amiraslanov, N. T. Mamedov, G. S. Orudjev, M. B. Babanly, A. M. Shikin, and E. V. Chulkov // *Journal of Vacuum Science & Technology B*, -2019, -37, -062910.
42. Jahangirli, Z., Electronic structure and dielectric function of Mn-Bi-Te layered compounds / E. Alizade, Z. Aliev, M. Otrokov, N. Ismayilova, S. Mammadov, I. Amiraslanov, N. Mamedov, G. Orudjev, M. Babanly, A.

- Shikin, E. Chulkov, // *Journal of Vacuum Science & Technology B*, -2019, -37(6), -062910.
43. K. Seeger. *Semiconductor Physics* / - Springer Berlin, -Heidelberg, -1985.
44. Kane, C. L. *Z₂ Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect* / E. J. Mele // *Physical Review Letters.*, -2005, -95(14), -146802
45. Kim, E. Highly transparent all-dielectric metasurface to block the near-infrared region of the solar spectrum / Sangwon Baek, Jae Yong Park, Kwang Ho Kim, and Jong-Lam Lee // *Opt. Express*, -2020, -28, -30466-30477
46. Klitzing, K. v. New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance / G. Dorda; M. Pepper // *Phys. Rev. Lett.*, -1980, -45, -494–497.
47. Kobialka, A. Dynamical properties of the magnetic topological insulator TBi₂Te₄ (T = Mn, Fe): Phonons dispersion, Raman active modes, and chiral phonons study / M. Sternik, and A. Ptok // *Phys. Rev. B*, -2022, -105, -214304.
48. Kong, D. Ambipolar field effect in the ternary topological insulator (Bi_xSb_{1-x})₂Te₃ by composition tuning / Desheng Kong, Yulin Chen, J. J. Cha, Qianfan Zhang, James G. Analytis, Keji Lai, Zhongkai Liu, Seung Sae Hong, K. J. Koski, Sung-Kwan Mo, Z. Hussain, I. R. Fisher, Zhi-Xun Shen, Yi Cui // *Nature Nanotechnology*, -2011, -6(11), -705 –709.
49. Kosterlitz, J. M. Long Range Order and Metastability in Two Dimensional Solids and Superfluids (Application of Dislocation Theory)/ D. J. Thouless // *J. Phys. C: Solid State Phys.*, -1972, -5, -L124.
50. Kosterlitz, J. M. Ordering, Metastability and Phase Transitions in Two-Dimensional Systems / D. J. Thouless // *J. Phys. C: Solid State Phys.*, -1973, -6, -1181.
51. Köpf, M. Influence of magnetic ordering on the optical response of the antiferromagnetic topological insulator MnBi₂Te₄ / Ebad-Allah, S. H. Lee, Z. Q. Mao, and C. A. Kuntscher // *Phys. Rev. B*, -2020, -102, -165139.

52. Köpf, M. Infrared study of the layered, magnetic insulator $\text{Mn}(\text{Bi}_{0.07}\text{Sb}_{0.93})_2\text{Te}_4$ at low temperatures / S. H. Lee, H. Kumar, Z. Q. Mao, and C. A. Kuntscher // *Phys. Rev. B*, -2020, -105, -195125.
53. Lee, J.S. Optical response of relativistic electrons in the polar BiTeI semiconductor / G.A.H. Schober, M.S. Bahramy, H. Murakawa, Y. Onose, R. Arita, N. Nagaosa, Y. Tokura // *PRL*, -2011, -107, -117401, -1–5.
54. Lee, S. H. Spin scattering and noncollinear spin structure-induced intrinsic anomalous Hall effect in antiferromagnetic topological insulator MnBi_2Te_4 / Y. Zhu, Y. Wang, L. Miao, T. Pillsbury, H. Yi, S. Kempinger, J. Hu, C. A. Heikes, P. Quarterman, W. Ratcliff, J. A. Borchers, H. Zhang, X. Ke, D. Graf, N. Alem, C.-Z. Chang, N. Samarth, and Z. Mao // *Phys. Rev. Research*, -2019, -1, -012011.
55. Li, G. Observation of ultrastrong coupling between substrate and the magnetic topological insulator MnBi_2Te_4 / X. Wu, Y. Gao, X. Ma, F. Hou, H. Cheng, Q. Huang, Y.-Ch. Wu, M. C. DeCapua, Y. Zhang, J. Lin, Ch. Liu, L. Huang, Y. Zhao, J. Yan, M. Huang // *Nano Lett.*, 2022, -22, -3856.
56. Liu, Q. Y. Tunable Rashba effect in two-dimensional LaOBiS_2 films: ultrathin candidates for spin field effect transistors / Guo, A.J. Freeman // *Nano Lett.*, -2013, -13, -5264–5270.
57. Maier, S.A. *Plasmonics: Fundamentals and Applications* // Springer, -New York, -NY, -2007, -224.
58. Makhnev, A.A. Optical properties of BiTeI semiconductor with a strong Rashba spin-orbit interaction / L.V. Nomerovannaya, T.V. Kuznetsova, O.E. Tereshchenko, K. A. Kokh // *Opt. Spectrosc.*, -2014, -117, -764–768.
59. Mamedov, N. Infrared spectroscopic ellipsometry and optical spectroscopy of plasmons in classic 3d topological insulators / E. Alizade, Z. Jahangirli, Z. Aliev, N. Abdullayev, S. Mammadov, I. Amiraslanov, Y.G. Shim, K. Wakita, S. Ragimov, A. Bayramov, M. Babanly, A. Shikin, E. Chulkov, // *Journal of Vacuum Science & Technology B*, - 2019, - 37(6), - 062602.

60. Mamedov, N. Ternary compounds of Mn-Bi-Te family: electronic structure, optical properties and prospective application / Z. Jahangirli, I.R. Amiraslanov, Z.S. Aliyev, N. Abdullayev, A. Shikin, E.V. Chulkov, V. Zverev, S. Mammadov, E. Alizade // ITMC-21 Abstract Book, - 2018, -60
61. Mamedov, N.T. Infrared spectroscopic ellipsometry and optical spectroscopy of plasmons in Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , and Sb_2Te_3 / E.H. Alizade, Z.S. Aliev, S.N. Mammadov, N.A. Abdullayev, I.R. Amiraslanov, A.I. Bayramov, M.B. Babanly, J.N. Jalilli, A.M. Shikin, E.V. Chulkov // ICSE-8 Abstract Book, - Barselona, - 2019, - 229
62. Mamedov, N.T. Plasmons and interband optical transitions in BiTeI semiconductor / Z.S. Aliev, E.H. Alizade, S.N. Mammadov, M.B. Babanly, I.R. Amiraslanov, A.M. Shikin, E.V. Chulkov // ICSE-8 Abstract Book, - Barselona, - 2019, -187
63. Mamedov, N.T. Spectroscopic ellipsometry and free carrier plasma edge: topological insulators case / E.H. Alizade, Z.S. Aliev, Y.N. Aliyeva, Kh.N. Akhmedova, S.M. Bagirova, Tg Mammadov, Na Abdullayev, I.R. Amiraslanov, Ss Ragimov, And Z.A. Jahangirli // Proceedings of the 7th international conference MTP-2021: Modern trends in Physics Abstract Book, - 2021, -1, -Baku, -23-30 .
64. Mamedov, N.T. Spectroscopic Ellipsometry and Ab-Initio Studies of MnBi_2Te_4 and $\text{MnBi}_{0.5}\text{Sb}_{1.5}\text{Te}_4$: Dielectric Function and Free Carrier Plasma Edge / E.H. Alizade, Z.A. Jahangirli, Z.S. Aliev, I.R. Amiraslanov, S.N. Mammadov, M.M. Otrikov, E.V. Chulkov // ICSE-9 Abstract Book, - 2022, - Beijing, - 194
65. Manchon, A. New perspectives for Rashba spin-orbit coupling / H.C. Koo, J. Nitta, S.M. Frolov, R.A. Duine // Nat. Mater. -2015, -14, -871–882.
66. Maradudin, A.A. Modern Plasmonics / J.R. Sambles, W.L. Barnes // Amsterdam: Elsevier. -2014, -460
67. Miyao, M. T. Change of the electron effective mass in extremely heavily doped n-type Si obtained by ion implantation and laser annealing / Motooka,

- N. Natsuaki and T. Tokuyama // *Solid State Communications*, -1981, - 37, - 605-608.
68. Nechaev, I. A. Evidence for a direct band gap in the topological insulator Bi_2Se_3 from theory and experiment / R. C. Hatch, M. Bianchi, D. Guan, C. Friedrich, I. Aguilera, J. L. Mi, B. B. Iversen, S. Blügel, Ph. Hofmann, and E. V. Chulkov // *Phys. Rev. B*, -2013, -87, -121111(R)
69. Otrokov, M. M. Prediction and observation of an antiferromagnetic topological insulator / I.I. Klimovskikh, H. Bentmann, D. Estyunin, A. Zeugner, Z.S. Aliev, S. Gaß, A.U.B. Wolter, A.V. Koroleva, A. M. Shikin, M. Blanco-Rey, M. Hoffmann, I. P. Rusinov, A. Yu. Vyazovskaya, S.V. Ereemeev, Yu. M. Koroteev, V.M. Kuznetsov, F. Freyse, J. Sánchez-Barriga, I.R. Amiraslanov, M.B. Babanly, N. T. Mamedov, N. A. Abdullayev, V.N. Zverev, A. Alfonsov, V. Kataev, B. Büchner, E.F. Schwier, S. Kumar, A. Kimura, L. Petaccia, G. Di Santo, R.C. Vidal, S. Schatz, K. Kißner, M. Ünzelmann, C.H. Min, S. Moser, T.R.F. Peixoto, F. Reinert, A. Ernst, P.M. Echenique, A. Isaeva, E.V. Chulkov // *Nature*, -2019, -576, -416.
70. Pankratov, O. A. Supersymmetry in heterojunctions: Band-inverting contact on the basis of $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ and $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ / S. V. Pakhomov,; B. A. Volkov // *Solid State Communications.*, -1987, -61(2), -93–96.
71. Pei, C. Pressure-induced topological and structural phase transitions in an antiferromagnetic topological insulator / Y. Xia, J. Wu, Y. Zhao, L. Gao, T. Ying, B. Gao, N. Li, W. Yang, D. Zhang, H. Gou, Y. Chen, H. Hosono, G. Li, and Qi Y // *Chin. Phys. Lett.*, -2020, -37, -066401.
72. Pidgeon, C.R. Free carrier optical properties of semiconductors / T.S. Moss, M. Balkanski (Eds.) // *Handbook On Semiconductors*, -North Holland, Amsterdam, -1980, -2, - 227–230.
73. Pitarke, J.M. Theory of surface plasmons and surface-plasmon polaritons / V.M. Silkin, E.V. Chulkov, P.M. Echenique // *Rep. Prog. Phys.*, -2006, -70 (1), -1–87.

74. Ponosov, Yu.S. Dynamics of the BiTeI lattice at high pressures / T.V. Kuznetsova, O.E. Tereshchenko, K.A. Kokh, E.V. Chulkov // JETP Lett., - 2013, -98, -557–561.
75. Raether, H. Springer Tracts in Modern Physics: Surface plasmons on smooth and rough surfaces and on gratings // Springer-Verlag, -Berlin, -Heidelberg -1988, -1988, -111, -117.
76. Rodriguez-Vega, M. Group theory study of the vibrational modes and magnetic order in the topological antiferromagnet MnBi_2Te_4 / A. Leonardo, G. A. Fiete // Phys. Rev. B, -2020, -102, -104102.
77. Rusinov, I.P. Role of anisotropy and spin-orbit interaction in the optical and dielectric properties of BiTeI and BiTeCl compounds / O.E. Tereshchenko, K.A. Kokh, A.R. Shakhmametova, I.A. Azarov, E. V. Chulkov // JETP Lett., -2015, -101, -507–512.
78. S. Schwalbe, R. Wirnata, R. Starke, G.A.H. Schober, J. Kortus, Ab initio electronic structure and optical conductivity of bismuth tellurohalides, Phys. Rev. B, -2016, -94, -205130, -1–7.
79. Schnyder, A. P. Classification of Topological Insulators and Superconductors / Shinsei Ryu, Akira Furusaki, and A.W. W. Ludwig // AIP Conference Proceedings, 2009, -1134, -10-21
80. Sehr, R. The optical properties of p-type $\text{Bi}_2\text{Te}_3 \cdot \text{Sb}_2\text{Te}_3$ alloys between 2–15 microns / L.R. Testardi // Journal of Physics and Chemistry of Solids, - 1962, -23, -9, -1219-1224.
81. Shameli, M.A. Absorption enhancement in thin-film solar cells using an integrated metasurface lens / L. Yousefi // Journal of the Optical Society of America B, -2018, -2035(2), -223
82. Shim, Y. Spectroscopic Ellipsometry Studies of CdS:O Layers for Solar Cells / Sakamoto J., Suzuki A., Khalilova Kh., Wakita K., Mamedov N., Bayramov A., Huseynov E., Hasanov I. // Japanese Journal of Applied Physics, -2011, - 50, - 05FC14

83. Shim, Y. Spectroscopic Ellipsometry Studies of CdS:O Layers for Solar Cells / J. Sakamoto, A. Suzuki, Kh. Khalilova, K. Wakita, N. Mamedov, A. Bayramov, E. Huseynov, İ. Hasanov // 17th International Conference on Ternary and Multinary Compounds (ITMC-17), Baku, 2010, p. 71
84. Smith, D. R. Composite Medium with Simultaneously Negative Permeability and Permittivity / W. J. Padilla, D. C. Vier, S. C. Nemat-Nasser, S. Schultz // Physical Review Letters, -2000, -84(18), -4184–4187
85. Swatek, P. Gapless Dirac surface states in the antiferromagnetic topological insulator MnBi_2Te_4 / Y. Wu, L.-L. Wang, K. Lee, B. Schrunck, J. Yan, and A. Kaminski // Phys. Rev. B, -2020, -101, -161109
86. Thomas, G. A. Large electronic-density increase on cooling a layered metal: Doped Bi_2Te_3 / D. H. Rapkine, R. B. Van Dover, L. F. Mattheiss, W. A. Sunder, L. F. Schneemeyer, and J. V. Waszczak // Phys. Rev. B, -1992, -46, -1553.
87. Thouless, D. J. Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential / M. Kohmoto, M. P. Nightingale, M. den Nijs // Phys. Rev. Lett., -1982, -49, -405–408.
88. Tiwald, T. E. Application of IR variable angle spectroscopic ellipsometry to the determination of free carrier concentration depth profiles / D. W. Thompson, J. A. Woollam, W. Paulson, and R. Hance // Thin Solid Films, -1998, -313, -313.
89. Tran, M.K. Infrared- and Raman-spectroscopy measurements of a transition in the crystal structure and a closing of the energy gap of BiTeI under pressure / J. Levallois, P. Lerch, J. Teyssier, A.B. Kuzmenko, G. Autès, O. V. Yazyev, E. Giannini Ubaldini, D. van der Marel, A. Akrap // PRL, -2014, -112 (1–5), -047402.
90. Volkov, B. A. Two-dimensional massless electrons in an inverted contact / O. A. Pankratov // JETP Letters., -1985, -42(4), -178–181.
91. Wu, L. Enhanced Thermoelectric Performance in Cu-Intercalated BiTeI by Compensation Weakening Induced Mobility Improvement / J. Yang, M. Chi,

- Sh. Wang, P. Wei, W. Zhang, L. Chen, J. Yang // *Sci. Rep.*, -2015, -5 (1–12), -14519.
92. Yan, J.-Q. Crystal growth and magnetic structure of MnBi_2Te_4 / Q. Zhang, T. Heitmann, Z. Huang, K. Y. Chen, J.-G. Cheng, W. Wu, D. Vaknin, B. C. Sales, and R. J. McQueeney // *Phys. Rev. Materials*, -2019, -3, -064202.
93. Yang, L. High-efficiency all-dielectric transmission metasurface for linearly polarized light in the visible region / Dong Wu, Yumin Liu, Chang Liu, Zenghui Xu, Hui Li, Zhongyuan Yu, Li Yu, Han Ye // *Photon. Res.*, -2018, -6, -517-524
94. Zeugner, A. Absence of a Dirac gap in ferromagnetic $\text{Cr}_x(\text{Bi}_{0.1}\text{Sb}_{0.9})_{2-x}\text{Te}_3$ / F. Nietschke, A. U. B. Wolter, S. Gaß, R. C. Vidal, T. R. F. Peixoto, D. Pohl, C. Damm, A. Lubk, R. Hentrich, S. K. Moser, C. Fornari, C. H. Min, S. Schatz, K. Kißner, M. Ünzelmann, M. Kaiser, F. Scaravaggi, B. Rellinghaus, K. Nielsch, C. Hess, B. Büchner, F. Reinert, H. Bentmann, O. Oeckler, T. Doert, M. Ruck, and A. Isaeva // *Chem. Mater.*, -2019, -31, -2795.
95. Zhang, Two-dimensional large gap topological insulators with tunable Rashba spin-orbit coupling in group-IV films / Sh.-J. W.-X. Ji, Ch.-W. Zhang, P. Li, P.-J. Wang // *Sci. Rep.*, -2017, -7 (1–12), -45923.
96. Zhao, Y. Interlayer vibrational modes in few quintuple layer Bi_2Te_3 and Bi_2Se_3 two-dimensional crystals: Raman spectroscopy and first-principles studies / X. Luo, J. Zhang, J. Wu, X. Bai, M. Wang, J. Jia, H. Peng, Z. Liu, S. Y. Quek, and Q. Xiong // *Phys. Rev. B*, -2014, -90, -245428.
97. Абдуллаев, Н. А. Динамика решетки Bi_2Te_3 и колебательные моды в рамановском рассеянии топологических изоляторов $\text{MnBi}_2\text{Te}_4 \cdot n(\text{Bi}_2\text{Te}_3)$, / И. Р. Амирасланов, З. С. Алиев, З. А. Джахангирли, И. Ю. Складнева, Е. Г. Ализаде, Е. Н. Алиева, М. М. Отроков, В. Н. Зверев, Н. Т. Мамедов, Е. В. Чулков // *Письма в ЖЭТФ*, - 2022, -115(12), - 801–808

98. Ализаде, Э.Г. Исследование плазмонного резонанса в Bi_2Se_3 и Sb_2Te_3 методом инфракрасной спектральной эллипсометрии // Оптика и спектроскопия, - 2022, - 130, -2, -249-253
99. Аскеров, Б.М. Электронные явления переноса в полупроводниках // Москва: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., -1985.— 320 с.
100. Гольцман, Б.М. Полупроводниковые термоэлектрические материалы на основе Bi_2Te_3 / В.А. Кудинов, И.А. Смирнов // М., Наука, -1972. -320с
101. Кардона, М. Модуляционная спектроскопия // Москва, Мир, -1972, - 416 стр.