

Электронная, спиновая структура и магнитные свойства собственных антиферромагнитных топологических изоляторов семейства $\text{MnBi}_2\text{Te}_4(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$ (Миниобзор)

А. М. Шикин¹⁾, Д. А. Естюнин, Д. А. Глазкова, С. О. Фильнов, И. И. Климовских

Санкт-Петербургский государственный Университет, 198504 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 9 декабря 2021 г.

После переработки 23 декабря 2021 г.

Принята к публикации 24 декабря 2021 г.

Магнитные топологические изоляторы (ТИ) являются узкозонными полупроводниковыми материалами, сочетающими нетривиальную зонную структуру и магнитный порядок. В отличие от своих немагнитных аналогов, магнитные ТИ могут иметь запрещенную зону в электронной структуре поверхностных состояний, что делает возможным ряд экзотических явлений, таких как квантовый аномальный эффект Холла и хиральные фермионы Майораны, которые имеют потенциальное применение в спинтронике. До сих пор магнитные ТИ создавались только путем легирования 3d элементами переходных металлов (Cr, Co, V, Fe, Mn). Однако такой подход приводит к сильно неоднородным магнитным и электронным свойствам этих материалов, ограничивая наблюдение упомянутых эффектов очень низкими температурами. Собственный магнитный ТИ – стехиометрическое хорошо упорядоченное магнитное соединение – может стать идеальным решением этих проблем. В данном обзоре будут представлены результаты экспериментального изучения электронных и магнитных свойств первого представителя собственного магнитного ТИ – MnBi_2Te_4 , а также семейства подобных ТИ – $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$, $m \geq 1$, конструируемых из последовательности магнитных блоков (MnBi_2Te_4), разделенных различным числом (m) немагнитных блоков (Bi_2Te_3). Влияние магнетизма на электронную структуру сильнее всего проявляется в MnBi_2Te_4 и спадает с увеличением m . Так, MnBi_2Te_4 имеет антиферромагнитное упорядочение слоев Mn в соседних блоках и температуру магнитного перехода (температуру Нееля) около 24.5 К. Антиферромагнитный порядок также наблюдается для соединений с $m = 1$ и 2, однако, со значительно меньшей температурой упорядочения, равной 13 и 11 К, соответственно. При больших значениях m магнитные блоки MnBi_2Te_4 практически не взаимодействуют и, по сути, оказываются двумерными магнетиками. Электронная структура топологических поверхностных состояний для данного семейства характеризуется одним конусом Дирака, вид и свойства которого зависят от m и от магнитной/немагнитной терминации при $m \geq 1$. В случае магнитной терминации поверхности возможно открытие запрещенной зоны в точке Дирака. Для MnBi_2Te_4 она максимальна и ожидается на уровне 80–90 мэВ. Однако, экспериментально показана возможность ее изменения в диапазоне практически от 0 и до 70 мэВ для разных образцов. На основе расчетов методом теории функционала плотности будут представлены причины подобных отклонений.

DOI: 10.31857/S1234567822040073

Одной из наиболее важных и значимых научных проблем современной физики твердого тела является поиск, изучение и эффективное использование новых топологических квантовых эффектов и систем с уникальным сочетанием топологических и магнитных свойств. Наиболее яркими проявлениями подобных эффектов являются квантовый аномальный эффект Холла (КАЭХ) и топологический квантовый магнитоэлектрический (МЭ) эффект [1–5]. Интенсивное

изучение данных эффектов началось с получения магнитных топологических изоляторов (ТИ), первым из которых оказались ТИ, легированные атомами магнитных металлов [1–10]. В чистых ТИ, например, Bi_2Te_3 , Bi_2Se_3 и Sb_2Te_3 , комбинация симметрии относительно обращения времени и большого спин-орбитального взаимодействия приводит к изменению топологии системы и формированию топологических поверхностных состояний (ТПС) на границе с тривиальным изолятором (например, вакуумом). Электронная структура ТПС имеет форму дираков-

¹⁾e-mail: ashikin@inbox.ru

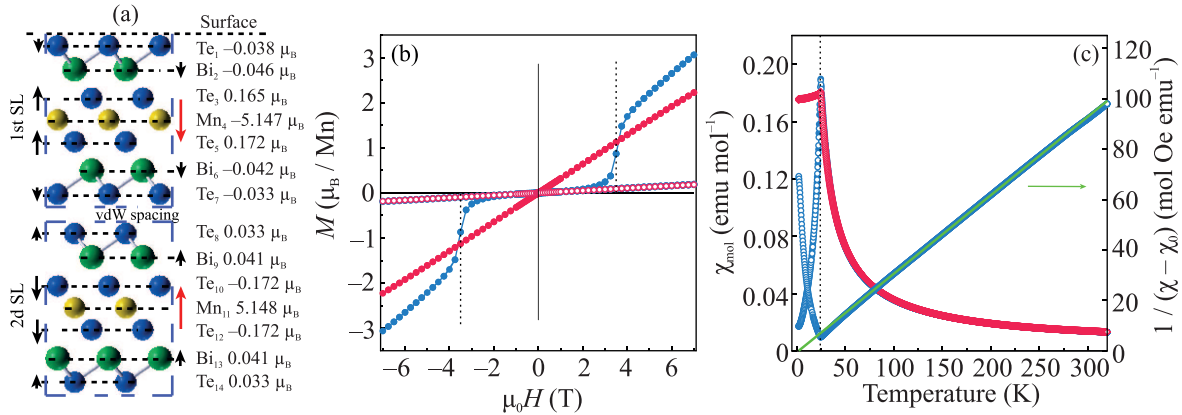


Рис. 1. (Цветной онлайн) MnBi_2Te_4 . (a) – Кристаллическая структура с представлением ориентации и значений магнитных моментов атомов в первых двух поверхностных блоках. (b) – Зависимость намагниченности от величины приложенного магнитного поля $M(H)$ в направлении перпендикулярно (синие символы) и параллельно (красные символы) поверхности при температурах 2 и 300 К, закрытые и открытые символы соответственно. (c) – Экспериментальная зависимость магнитной восприимчивости от температуры, измеренная при приложении магнитного поля 1 Тл перпендикулярно и вдоль поверхности образца (синие и красные символы соответственно). Для поля, направленного перпендикулярно поверхности, представлена также обратная зависимость магнитной восприимчивости (шкала справа), которая была аппроксимирована модифицированным законом Кюри–Вейса $\chi(T) = \chi_0 + C/(T - \theta_{CW})$ в диапазоне температур 100–250 К. Закрытые и открытые символы соответствуют измерениям с охлаждением при нулевом магнитном поле и в приложенном магнитном поле соответственно. Взято из статей [27, 49]

ского конуса с линейной дисперсией, геликоидальной спиновой структурой и единственной точкой вырождения по спину – точкой Дирака. ТПС имеют энергетическую локализацию вблизи уровня Ферми в области объемной запрещенной зоны. Таким образом ТИ оказываются проводниками на поверхности за счет ТПС и изоляторами в объеме. Введение магнитного обменного взаимодействия в ТИ нарушает симметрию относительно обращения времени, снимает вырождение по спину и может открывать энергетическую запрещенную зону (далее ЭЗЗ) в точке Дирака. Собственно, появление магнитной ЭЗЗ на уровне Ферми позволяет реализовать в ТИ различные новые квантовые явления, включая КАЭХ, МЭ отклик, и может привести к появлению фазы аксионного изолятора [1–10]. Все это делает магнитные ТИ чрезвычайно привлекательными для приложений в современной наноэлектронике и зарождающейся двумерной и антиферромагнитной спинтронике [11–16]. Однако, все известные ТИ состоят из тяжелых *sp* элементов с сильным спин-орбитальным взаимодействием, таких как Bi, Sb, Te, Se, и являются немагнитными соединениями. Таким образом, основной задачей для реализации фазы магнитного ТИ и всех упомянутых эффектов является поиск и изучение способов создания магнетизма в ТИ и открытия ЭЗЗ в точке Дирака [4].

Введение обменного взаимодействия в ТИ может быть достигнуто путем легирования магнитными атомами чистого ТИ [1–5, 17–23], что, например, позволило впервые реализовать состояние КАЭХ в Sn-легированном $(\text{Bi,Sb})_2\text{Te}_3$ [3]. Магнитное легирование является эффективным, однако, все еще экспериментально сложным методом для обеспечения магнитного обменного взаимодействия. Причиной этого является неоднородность распределения магнитных примесей, что приводит к существенной вариации магнитных свойств по поверхности и, как следствие, величины ЭЗЗ [24]. Кроме этого, достаточно перспективными могут быть способы поверхностного легирования ТИ, что также приводит к появлению ЭЗЗ, но не вносит дополнительные дефекты в объем ТИ [25, 26].

На данный момент наиболее эффективным способом формирования индуцированного обменного взаимодействия в ТИ является введение магнитного атома непосредственно в структуру элементарной ячейки ТИ, т.е. получение собственного магнитного ТИ. В таком материале магнитные атомы оказываются равномерно распределены по объему и могут достаточно эффективно взаимодействовать с ТПС. Первым успешно синтезированным и изученным представителем подобных ТИ является соединение MnBi_2Te_4 [27–35]. Данный ТИ, как и Bi_2Te_3 , является блочным Ван-дер-Ваальсовым кристаллом с

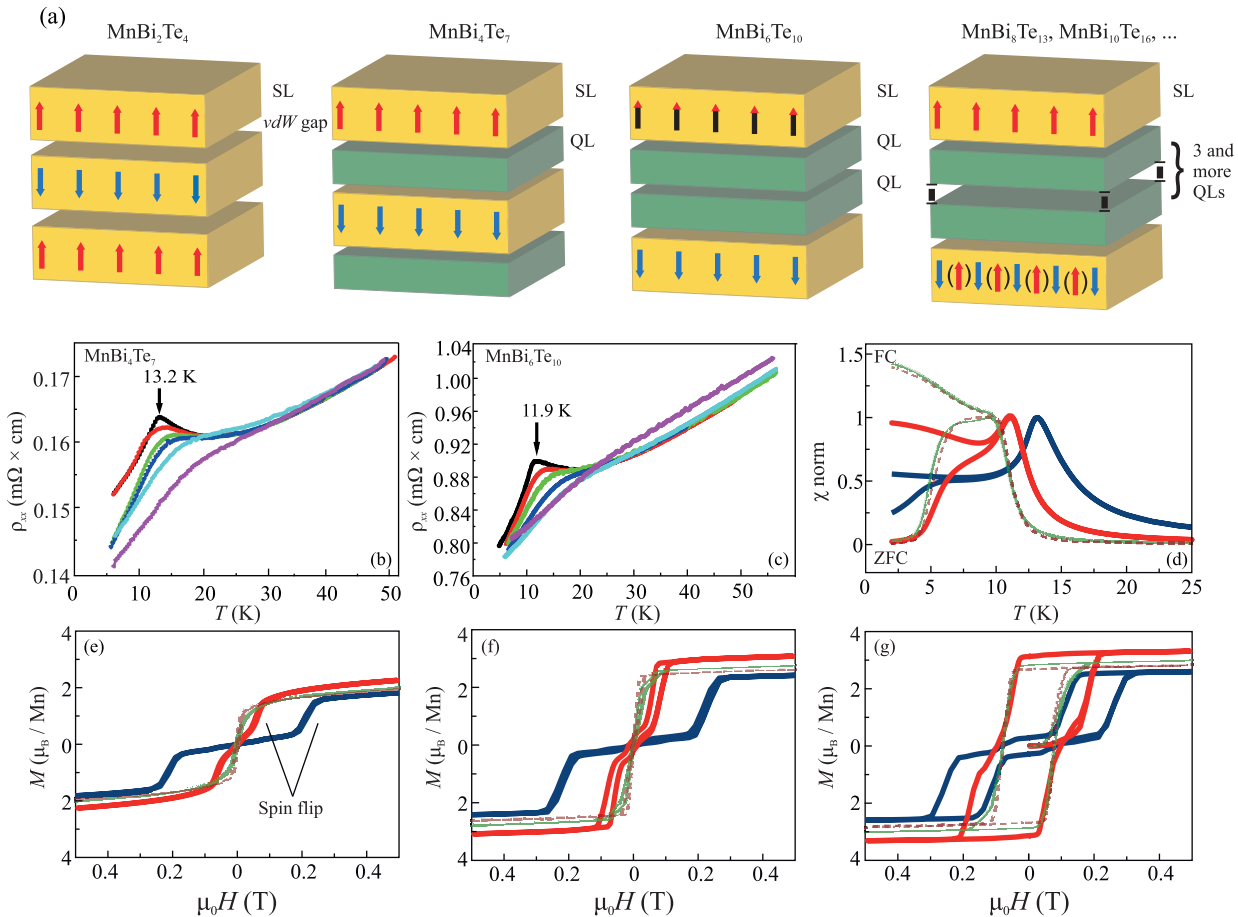


Рис. 2. (Цветной онлайн) $(MnBi_2Te_4)(Bi_2Te_3)_m$. (a) – Схематическое представление структуры для соединений семейства $(MnBi_2Te_4)(Bi_2Te_3)_m$. (b), (c) – Температурная зависимость удельного сопротивления для $MnBi_4Te_7$ и $MnBi_6Te_{10}$ при различных магнитных полях, направленных перпендикулярно поверхности образцов (0 Тл – черные, 0.2 Тл – красные, 0.35 Тл – зеленые, 0.5 Тл – синие, 1 Тл – голубые, 2 Тл – фиолетовые символы соответственно). (d) – Нормированная магнитная восприимчивость для соединений $MnBi_4Te_7$, $MnBi_6Te_{10}$, $MnBi_8Te_{13}$ и $MnBi_{10}Te_{16}$ (синие ($T_N = 13$ К), красные ($T_N = 11$ К), зеленые ($T_C = 12$ К) и фиолетовые кривые соответственно) в зависимости от температуры, измеренная с охлаждением при нулевом магнитном поле (ZFC) и в поле (FC) 0.1 Тл для $MnBi_4Te_7$ и 5 мТл для $MnBi_6Te_{10}$, $MnBi_8Te_{13}$ и $MnBi_{10}Te_{16}$. (e)–(g) – Зависимости $M(H)$, измеренные при различных температурах ($T = 10$ К (e), $T = 5$ К (f) и $T = 2$ К (g)), для $MnBi_4Te_7$, $MnBi_6Te_{10}$, $MnBi_8Te_{13}$ и $MnBi_{10}Te_{16}$ – синие, красные, зеленые и фиолетовые кривые, соответственно). Взято из работы [41]

группой симметрии $R\bar{3}m$, где каждый блок имеет вид $Te-Bi-Te-Mn-Te-Bi-Te$ (рис. 1а) [32]. Таким образом $MnBi_2Te_4$ можно представить как Bi_2Te_3 со вставкой электронейтрального блока $MnTe$ в середину блока, при этом не нарушая инверсионную симметрию ТИ. Подобным способом возможно “спрятать” и другие элементы в элементарной ячейке Bi_2Te_3 , например Pb , Ge , Sn [36–38]. Кроме того блоки, содержащие $MnTe$, т.е. $MnBi_2Te_4$, могут чередоваться с блоками чистого Bi_2Te_3 , образуя целое семейство соединений вида $(MnBi_2Te_4)(Bi_2Te_3)_m$, где $m \geq 1$ (рис. 2а) [32–43].

$MnBi_2Te_4$ имеет антиферромагнитное (АФМ) упорядочение атомов Mn между блоками и ферромагнитное упорядочение внутри блока, как показано на рис. 1а. При этом объемная температура магнитного упорядочения – температура Нееля (T_N) – для $MnBi_2Te_4$ оказывается наиболее высокой среди магнитных ТИ – 24.5 К [27, 31, 44]. Для АФМ изоляторов классификация Z_2 может быть введена на основе симметрии $S = \theta T_{1/2}$, где θ – симметрия относительно обращения времени, а $T_{1/2}$ – примитивная трансляционная симметрия решетки [45]. Действительно, для $MnBi_2Te_4$ $Z_2 = 1$, что классифицирует

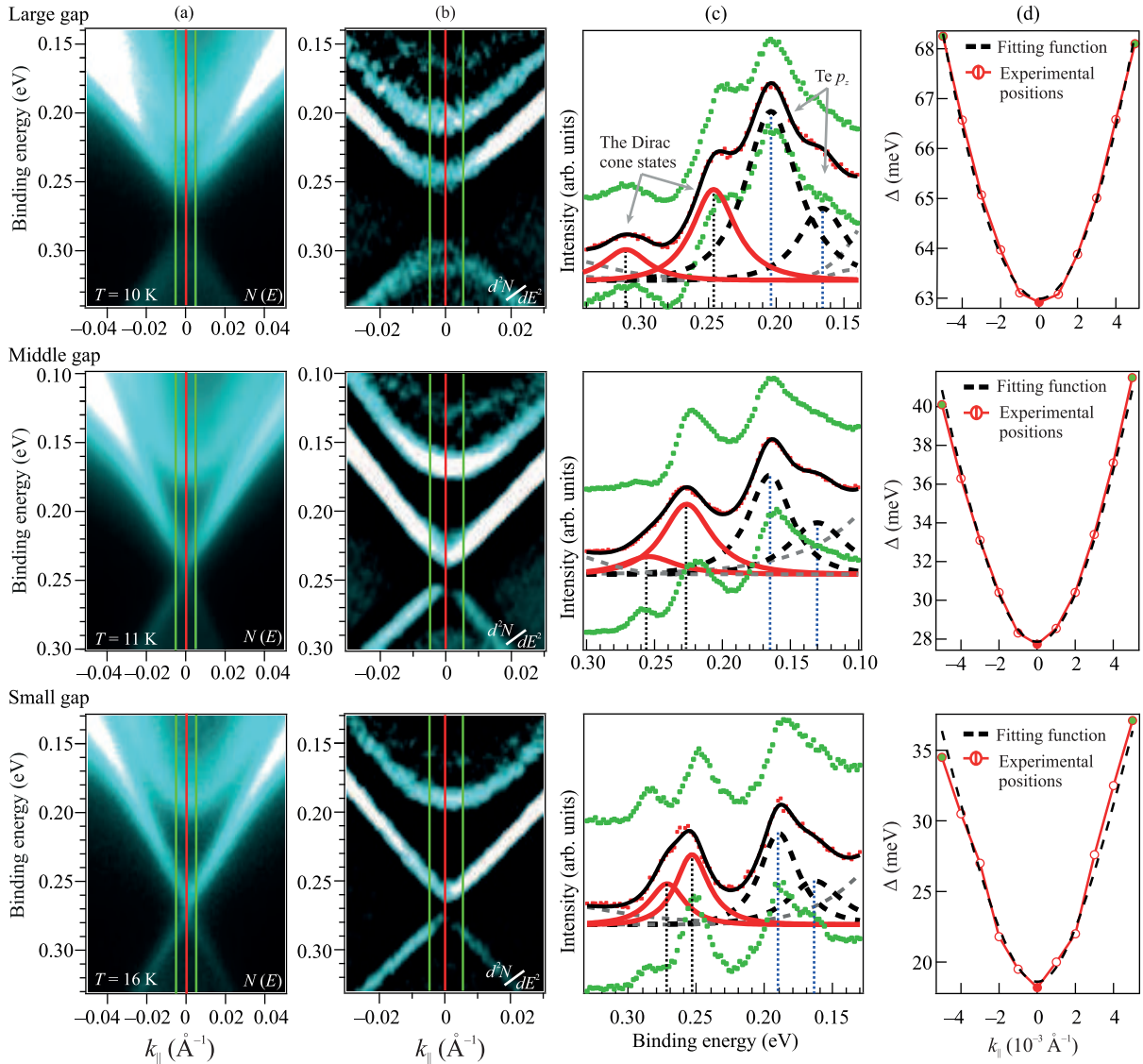


Рис. 3. (Цветной онлайн) (a) – Дисперсионные зависимости ТПС, измеренные для $MnBi_2Te_4$ методом ФЭСУР при $h\nu = 6.3$ эВ ($T = 10$ – 16 К) для образцов с различной величиной ЭЗЗ в точке Дирака и (b) – их представление в виде d^2N/dE^2 для лучшей визуализации. (c) – Соответствующие профили плотности электронных состояний в точке $\bar{\Gamma}$ (т.е. при $k_{\parallel} = 0$) – красными и зелеными символами показаны профили вне точки $\bar{\Gamma}$. Здесь же представлено разложение на спектральные компоненты – красным цветом для состояний конуса Дирака, показывающее величину ЭЗЗ. Черным цветом показаны состояния, соответствующие обменно-расщепленным состояниям $Te p_z$. (d) – Зависимость расщепления между состояниями верхней и нижней части конуса Дирака в зависимости от величины волнового вектора (k_{\parallel}). Взято из работы [48]

его как АФМ ТИ [27]. На поверхности (0001) для $MnBi_2Te_4$ S -симметрия оказывается нарушенной, в результате чего намагниченность, направленная перпендикулярно этой поверхности (далее *out-of-plane*), от ближайшего слоя Mn открывает ЭЗЗ в точке Дирака. Стоит отметить, что при этом материал меняет свой топологический класс с \mathbb{Z}_2 на $C = 0, \pm 1$ и становится так называемым изолятором Черна. Это оказывается также справедливо и для

других членов семейства $(MnBi_2Te_4)(Bi_2Te_3)_m$. Согласно теоретическим оценкам для идеальной структуры в $MnBi_2Te_4$ данная ЭЗЗ оказывается около 80-90 мэВ, экспериментальные оценки дают сильно различающиеся результаты в диапазоне от 0 и до 70 мэВ (также рис. 3) [27, 29, 31, 46–49].

С ростом m в $(MnBi_2Te_4)(Bi_2Te_3)_m$ уменьшается взаимодействие между магнитными блоками. При $m = 1$ ($MnBi_4Te_7$) и $m = 2$ ($MnBi_6Te_{10}$), антиферро-

магнитный порядок между слоями сохраняется. Однако, уже при $m \geq 3$ блоки MnBi_2Te_4 практически не взаимодействуют и, по сути, оказываются двумерными магнетиками. Изменение ориентации магнитных моментов с ростом m показано на рис. 2а. Также для $m \geq 1$ возможны различные терминации поверхности (7-5- и 5-7- для $m = 1$, 7-5-5-, 5-7-5- и 5-5-7- для $m = 2$ и т.д., где 7 – блок MnBi_2Te_4 , 5 – блок Bi_2Te_3), обладающие различными электронными свойствами.

Упорядоченное расположение магнитных атомов, достаточно большая ЭЗЗ в точке Дирака и высокая температура магнитного упорядочения делает семейство $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$ перспективным для наблюдения высокотемпературного КАЭХ. Действительно, в работе [7] была показана возможность реализации КАЭХ в тонких слоях MnBi_2Te_4 при температуре 1.4 К, а при приложении внешнего магнитного поля температура перехода составила 6.5 К. Также была показана возможность реализации КАЭХ для системы $\text{MnBi}_{10}\text{Te}_{16}$ [40], которая, по сути, является двумерным магнетиком. Тем не менее до сих пор остается ряд существенных проблем, решение которых позволило бы наблюдать высокотемпературный КАЭХ в MnBi_2Te_4 . К таким проблемам в первую очередь можно отнести наличие естественных точечных дефектов кристаллической структуры [50] и, как возможное следствие наличия данных дефектов, экспериментально наблюдаемую дисперсию с близкой к нулевой ЭЗЗ в точке Дирака [33, 35, 51, 52].

Анализ магнитных свойств систем $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$. Изменение степени взаимодействия между магнитными Mn-слоями при введении промежуточных немагнитных слоев Bi_2Te_3 изменяет магнитные свойства системы $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$ и влияет на температуру и характер объемного магнитного упорядочения (ФМ или АФМ). Различие в характере и величине магнитного взаимодействия в данных системах в свою очередь будет сказываться на изменениях электронной структуры ТПС, а также на величине и свойствах ЭЗЗ в точке Дирака, так как магнетизм играет определяющую роль в ее формировании. Таким образом, изучение магнитных свойств ТИ может дать важную информацию о модификации ТПС. Ниже будут показаны результаты измерений магнитных свойств, полученных методом сверхпроводящей магнитометрии (СКВИД), температурной зависимости удельного сопротивления, и представлены оценки изменений величины T_N в ряду $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$.

MnBi_2Te_4 . На рисунке 1b представлена зависимость намагничивания системы от приложенно-

го магнитного поля $M(H)$ для случаев направления магнитного поля перпендикулярно и параллельно поверхности образца. Измерения проводились при температурах 2 и 300 К (т.е. существенно ниже и выше T_N). Представленные зависимости подтверждают общий АФМ характер взаимодействия в объеме образца с ярко-выраженным спин-флоп (*spin-flop*) переходом при величине приложенного магнитного поля 3.5 Тл. При спин-флоп переходе направления намагниченности подрешеток становятся перпендикулярными внешнему магнитному полю, которое направлено по нормали к поверхности, что подтверждает “*out-of-plane*” АФМ ориентацию магнитных моментов в нулевом магнитном поле.

На рисунке 1с представлены зависимости магнитной восприимчивости и обратной магнитной восприимчивости от температуры, измеренные методом СКВИД для MnBi_2Te_4 при приложении внешнего магнитного поля 1 Тл, направленного перпендикулярно и вдоль поверхности [27]. Измерения проводились двумя способами – с охлаждением без приложения магнитного поля (*zero-field-cooled* (ZFC)) и при охлаждении/нагревании в условиях приложенного магнитного поля (*field-cooled-warming* (FCW)). Представленная температурная зависимость магнитной восприимчивости имеет вид, характерный для АФМ с ярко выраженным пиком при температуре 24.2 К, что соответствует значению T_N для данного соединения. Ниже T_N наблюдается сильная анизотропия в поведении зависимости магнитной восприимчивости с резким (ступенчатым) уменьшением для случая магнитного поля, приложенного перпендикулярно поверхности. При этом расщепления зависимости магнитной восприимчивости при низких температурах для случаев охлаждения/нагревания в условиях приложенного магнитного поля и при нулевом магнитном поле не наблюдается. Аппроксимация зависимости обратной магнитной восприимчивости в рамках модифицированного закона Кюри–Вейсса в диапазоне температур 100–250 К дает положительное значение температуры Кюри–Вейсса ($\theta_{CW} = 3–6$ К), несмотря на общий АФМ характер температурной зависимости магнитной восприимчивости. Это свидетельствует о возможности локальных ФМ взаимодействий в системе [27].

$(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$. На рисунке 2b,с представлены температурные зависимости удельного сопротивления, измеренные при нулевом магнитном поле, которые демонстрируют металлический характер как для MnBi_4Te_7 , так и $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ [41]. При низких температурах для обоих соединений наблюдается хорошо определяемый излом при 13.2 К (для

MnBi_4Te_7) и 11.9 К (для $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$). При приложении внешнего магнитного поля эти особенности размываются, что указывает на их магнитное происхождение.

На рисунке 2d голубым цветом представлены сравнительные зависимости магнитной восприимчивости от температуры, измеренные для MnBi_4Te_7 с охлаждением в нулевом поле и в поле 0.1 Тл. Аппроксимация зависимости магнитной восприимчивости законом Кюри–Вейсса дает значение (θ_{CW}), равное 13.2 К [41]. Положительный знак и относительно высокое значение θ_{CW} (по сравнению со значением 3–6 К, наблюдаемым для MnBi_2Te_4 [27]) указывает на наличие доли ФМ-типа взаимодействия для MnBi_4Te_7 , несмотря на общий преобладающий АФМ характер магнитного упорядочения. Наблюдаемое понижение $T_N = 13$ К для MnBi_4Te_7 по сравнению с $T_N = 24.5$ К, характерной для MnBi_2Te_4 , обусловлено ослаблением обменного магнитного взаимодействия между Мп-слоями вследствие введения немагнитного блока Bi_2Te_3 в пространство между магнитными блоками.

Аналогичное поведение удельного сопротивления (рис. 2с) и магнитной восприимчивости (рис. 2d, кривая красного цвета) наблюдается и для $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$. Только в этом случае температура Нееля понижается до 11 К, вследствие введения второго дополнительного блока Bi_2Te_3 в пространство между магнитными блоками, что ведет к дальнейшему понижению обменного магнитного взаимодействия между магнитными Мп-слоями. Для данного соединения наличие взаимодействий ФМ-типа проявляется уже более явно – в более значительном расщеплении кривых магнитной восприимчивости при низких температурах при измерениях с охлаждением в магнитном поле (FC) и без приложения магнитного поля (ZFC). Это свидетельствует об усилении конкуренции между АФМ и ФМ типами взаимодействий в данном соединении. Соединения со стехиометрическим составом $\text{MnBi}_8\text{Te}_{13}$ и $\text{MnBi}_{10}\text{Te}_{16}$ (т.е. следующие члены ряда $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$ при $m = 3$ и 4) характеризуются уже скорее ФМ типом взаимодействия с температурой Кюри ($T_C = 12$ К). Доля ФМ взаимодействий для данных соединений, проявляющаяся в явном и значительном расщеплении кривых магнитной восприимчивости (рис. 2d), существенно увеличена. Аналогичное поведение ожидается и для следующих членов ряда с $m = 5$ и $m = 6$ (соединения со стехиометрией $\text{MnBi}_{12}\text{Te}_{19}$ и $\text{MnBi}_{14}\text{Te}_{22}$, соответственно) вследствие дальнейшего уменьшения обменного магнитного взаимодействия между блоками MnBi_2Te_4

при дальнейшем увеличении числа промежуточных немагнитных слоев Bi_2Te_3 [41].

На рисунке 2e–g представлены зависимости $M(H)$ индуцированной намагниченности от приложенного магнитного поля, измеренные при различных температурах для всех соединений с $m = 1–4$. При температуре 10 К (что немного ниже T_N для всех данных соединений) $M(H)$ зависимость для MnBi_4Te_7 демонстрирует явно выраженное поведение, характерное для АФМ со спин-флип (*spin-flip*) разворотами при магнитном поле 0.2 Тл. При этом намагниченности подрешеток выравниваются параллельно внешнему магнитному полю, причем при существенно меньших значениях полей в сравнении со спин-флоп переходом при 3.5 Тл, характерным для MnBi_2Te_4 (см. рис. 1b) [27]. Постепенное уменьшение межслоевого обменного взаимодействия при увеличении m приводит к дальнейшему уменьшению данной величины. Для $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ зависимость $M(H)$ (см. красную кривую на рис. 2e) демонстрирует спин-флип переход уже при 0.07 Тл. При этом для ТИ со стехиометрией $\text{MnBi}_8\text{Te}_{13}$ и $\text{MnBi}_{10}\text{Te}_{16}$ ход зависимости $M(H)$ имеет вид, скорее характерный для ФМ типа взаимодействия. При более низких температурах ($T = 5$ и 2 К на рис. 2f, g) зависимости спин-флип переходов проявляют уже характер гистерезиса.

Для MnBi_4Te_7 ($m = 1$) формирование гистерезисной петли имеет место в области магнитных полей от 0.1 до 0.3 Тл. Для $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ ($m = 2$) наблюдается аналогичное ФМ-подобное поведение $M(H)$ зависимости с явной гистерезисной петлей, но уже при более низких магнитных полях [41]. Более того, при температуре 2 К в отсутствие внешнего поля, намагниченность не падает до нуля и образует ФМ гистерезисную петлю с малой и большой остаточной намагниченностью для соединений с $m = 1$ и 2, соответственно. Такое двойное комплексное метамагнитное поведение можно объяснить наличием доменов как с ФМ, так и АФМ упорядочением между соседними магнитными Мп-слоями. Однако для соединения с $m = 2$ остаточная намагниченность близка к насыщению, что показывает, что принудительное ФМ состояние может выжить при нулевых и даже при небольших отрицательных магнитных полях, когда термические флуктуации достаточно слабы.

Аналогичное метамагнитное поведение для MnBi_4Te_7 и $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ отмечалось недавно в работах [39, 40, 43, 44, 53]. При этом $\text{MnBi}_8\text{Te}_{13}$ ($m = 3$) отчетливо демонстрирует почти идеальную гистерезисную петлю, характерную для чистого ФМ материала. Небольшие отклонения от S-образной

кривой можно отличить только при $T = 5$ К. Отметим, что объемное ФМ упорядочение для $\text{MnBi}_8\text{Te}_{13}$ наблюдалось также в работе [54].

Таким образом, представленные данные свидетельствуют о том, что для соединений стехиометрического ряда $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$ сила АФМ обменного взаимодействия между блоками постепенно уменьшается с увеличением m . При этом характер взаимодействия меняется от АФМ ($m = 0, 1, 2$) к ФМ ($m = 3$), а затем следует переход в чисто двумерный магнитный режим, начиная с $m = 4$. В сочетании с нетривиальной топологией соединений $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$ эти магнитные состояния приводят к появлению фаз АФМ ТИ и ФМ ТИ для $m = 0, 1, 2$ и $m = 3$ соответственно, в то время как для $m=4$ образуется новая фаза магнитных ТИ, в которой ниже температуры перехода намагниченность двумерных ФМ-упорядоченных слоев Mn в блоках MnBi_2Te_4 оказывается разупорядоченной вдоль [0001] направления. Экспериментальные данные по магнитной структуре хорошо согласуются с расчетами, демонстрирующими как ферромагнетизм внутри блока MnBi_2Te_4 , так и существенное уменьшение обменного взаимодействия между блоками MnBi_2Te_4 с увеличением количества промежуточных немагнитных блоков Bi_2Te_3 .

Анализ величины ЭЗЗ в точке Дирака для соединений семейства $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$ и возможность ее модуляции. MnBi_2Te_4 . Величина ЭЗЗ в точке Дирака для MnBi_2Te_4 , согласно теоретическим оценкам, должна составлять 80–90 мэВ [27, 48, 49]. Однако, согласно экспериментальным исследованиям, величина ЭЗЗ может варьироваться от максимальных значений 55–70 мэВ до минимальных около 10 мэВ и ниже [27, 31] при измерениях на различных образцах. Более того, в литературе появился ряд работ [33, 35, 51, 52], в которых предполагается возможность дисперсии ТПС с нулевой ЭЗЗ, измеренной методом ФЭС с угловым разрешением. При этом в наших последних работах [47–49] было показано, что величина ЭЗЗ в точке Дирака может значительно варьироваться для разных образцов в зависимости от энергии фотонов и других факторов, таких как дефектность образцов, локальная вариация стехиометрии, модификация поверхностного магнитного упорядочения и т.п. В частности, в ряде работ отсутствие ЭЗЗ в дисперсионных зависимостях ТПС связывалось с модификацией магнитного порядка в верхнем слое. В этом случае, согласно теоретическому моделированию [33], предполагается, что формирование дисперсии без ЭЗЗ в фотоэлектронных спектрах топологических состояний

для MnBi_2Te_4 может происходить за счет магнитной реконструкции поверхности, которая приводит к эффективному уменьшению компоненты out-of-plane магнитного момента в поверхностном слое Mn, отвечающей за открытие ЭЗЗ в точке Дирака. Это может быть обусловлено следующими причинами: (а) – образованием локальной АФМ связи вдоль поверхности в поверхностном магнитном слое, (б) – поворотом магнитных моментов в поверхностном магнитном слое вдоль поверхности, и (в) – образованием магнитно-неупорядоченного парамагнитного слоя на поверхности, т.е. формированием на поверхности “мертвого” магнитного слоя, приводящего к закрытию ЭЗЗ в точке $\bar{\Gamma}$ [33]. Однако, данные предположения, с одной стороны, противоречат результатам магнитных измерений методами рентгеновского рассеяния и магнитной магнитометрии (СКВИД), которые свидетельствуют об общем out-of-plane АФМ типе магнитного упорядочения в поверхностных слоях MnBi_2Te_4 [27, 44, 55, 56]. При этом магнитные измерения поверхностно-чувствительным методом магнитного циркулярного дихроизма внутренних уровней [27, 46, 47] указывают на сохранение out-of-plane ФМ ориентации в поверхностном блоке в MnBi_2Te_4 , независимо от разницы в измеренных величинах энергетической ЭЗЗ в точке Дирака. С другой стороны, теоретически было показано [33, 57], что сохранение out-of-plane ФМ типа магнитного упорядочения в поверхностном блоке, как представлено на рис. 1а является более энергетически выгодным, чем другие, отмеченные выше.

В то же время, согласно теоретическим оценкам [47], размер ЭЗЗ в точке Дирака для АФМ ТИ MnBi_2Te_4 может быть также изменен за счет уменьшения ван-дер-ваальсовых расстояний между первым и вторым блоками, сопровождающегося изменением локализации ТПС (при сохранении общего магнитного порядка в верхнем слое [47]). Смещение локализации ТПС в сторону второго более нижележащего блока, для которого характерна противоположная ориентация магнитных моментов на атомах (см. рис. 1а), может приводить к компенсации эффективного out-of-plane магнитного момента в области локализации ТПС и соответствующей модуляции величины ЭЗЗ в точке Дирака. Аналогичным образом, изменение величины ЭЗЗ может происходить за счет наличия и накопления поверхностных дефектов донорного или акцепторного типов различной концентрации, а также адсорбции молекул остаточных газов, которые могут вызывать изменения градиента поверхностного потенциала, что также сопровождается перераспределением плотности ТПС и соответ-

ствующей модуляцией величины ЭЗЗ в точке Дирака [48, 49]. Ниже, с одной стороны, будут показаны результаты экспериментальных исследований структуры ТПС и изменений величины ЭЗЗ в точке Дирака для различных образцов MnBi_2Te_4 . С другой стороны, будут представлены результаты расчетов методом теории функционала плотности (ТФП), показывающие влияние изменений градиента поверхностного потенциала, вызываемое вариацией электрического поля, приложенного перпендикулярно поверхности (или соответствующего заряда, локализованного на поверхности) на модуляцию величины ЭЗЗ в точке Дирака. Это сопровождается перераспределением в локализации ТПС и индуцированными изменениями магнитных моментов, локализованных на атомах Mn, Te и Bi в первых двух поверхностных блоках [48, 49]. При этом предполагается, что изменения в величине градиента поверхностного потенциала могут быть обусловлены влиянием различных факторов, в том числе вследствие накопления в области поверхности положительно или отрицательно заряженных дефектов различной концентрации (адсорбированных атомов, поверхностных ступенек и т.п.).

Экспериментальные наблюдения вариации ЭЗЗ в точке Дирака для MnBi_2Te_4 . На рисунке 3а показаны дисперсионные зависимости ТПС, измеренные методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ФЭСУР) для различных образцов MnBi_2Te_4 в области ЭЗЗ, открываемой в точке Дирака. Представлены дисперсионные зависимости ТПС для случаев трех различных величин ЭЗЗ для разных образцов MnBi_2Te_4 . Спектры были измерены с использованием лазерного излучения с энергией фотонов 6.3 эВ при температурах ниже температуры Нееля ($T_N = 24.5$ К). В левой колонке (а) представлены дисперсионные зависимости в форме $N(E)$, измеренные вдоль направления, проходящего через $\bar{\Gamma}$ -точку, для различных величин ЭЗЗ в точке Дирака из отмеченных выше энергетических диапазонов. В колонке (b) данные дисперсионные зависимости представлены в форме d^2N/dE^2 для лучшей визуализации изменений размеров ЭЗЗ. В колонке (c) красными символами и черными линиями показаны соответствующие срезы при постоянном волновом векторе, измеренные непосредственно в $\bar{\Gamma}$ -точке. Здесь же, для сравнения представлены срезы, измеренные по обе стороны от $\bar{\Gamma}$ -точки (при положительном и отрицательном k_{\parallel}), которые показаны синими и зелеными символами. В колонке (a) данные значения k_{\parallel} соответствуют вертикальным линиям также синего и зеленого цвета. В колонке (c) черными пунктирными лини-

ями представлено разложение измеренных спектров на спектральные составляющие. Энергетические положения данных спектральных компонент соответствуют краям ЭЗЗ в точке Дирака, и показывают изменения для различных образцов (см. вертикальные черные линии в области максимумов пиков в спектральных разложениях). Здесь же (колонка (c)) представлены особенности, обусловленные вкладом обменно-расщепленных Te p_z состояний (два пика, показанных черными пунктирными линиями в области состояний зоны проводимости). Энергетическое расщепление данных состояний может служить хорошим индикатором магнитного состояния системы [46]. Колонка (d) показывает изменения в энергетическом расщеплении между состояниями верхнего и нижнего конуса ТПС (полученные из аналогичных разложений на спектральные составляющие) при изменении значения k_{\parallel} в положительном и отрицательном направлениях относительно $\bar{\Gamma}$ -точки. Представленные зависимости аппроксимируются модельной кривой, характерной для дираковского конуса с ЭЗЗ: $E \sim (\alpha^2 k^2 + \Delta^2)^{1/2}$, где Δ определяет размер ЭЗЗ в точке Дирака, α – пропорциональна скорости Ферми. Такой подход позволяет уменьшить ошибку при оценке величины ЭЗЗ до ~ 5 мэВ. Минимальное энергетическое расщепление в $\bar{\Gamma}$ -точке соответствует величине ЭЗЗ в точке Дирака.

В ходе измерений по серии образцов было выявлено, что разные измеренные образцы характеризуются различными экспериментально измеренными ЭЗЗ в точке Дирака, величины которых концентрировались в энергетических диапазонах 50–65, 28–33 и 15–21 мэВ. Данные измерения (совместно с данными, представленными в литературе, отмеченными выше) показывают возможность изменения величины ЭЗЗ от нескольких мэВ и до нескольких десятков мэВ для различных образцов с различным состоянием поверхности, предположительно, с различной концентрацией и типом дефектов и адсорбированных атомов. При этом величина обменного расщепления Te p_z состояний в зоне проводимости для образцов, характеризующихся различной величиной ЭЗЗ в точке Дирака (см. рис. 3c), практически не изменяется. С учетом температурных изменений величины расщепления Te p_z состояний $E_{ex} = 38$ мэВ ($T = 10$ К), 36 мэВ ($T = 11$ К) и 27 мэВ ($T = 16$ К). Исходя из предполагаемой температурной зависимости обменного расщепления Te p_z состояний ($E_{ex} = E_0(1 - T/T_0)^{1/2}$) можно оценить величину расщепления E_0 при $T = 0$ К, равной ~ 45 мэВ для всех случаев 3-х представленных величин ЭЗЗ в точке Дирака [46]. При температуре выше T_N данные состояния

“схлопываются” по энергии для всех исследуемых образцов [27, 48, 49].

Таким образом, в то время как размер ЭЗЗ в точке Дирака значительно варьируется от образца к образцу, величина обменного расщепления $T_e p_z$ состояний (в насыщении) практически не меняется, указывая на эквивалентность магнитного состояния для всех исследуемых образцов, вне зависимости от величины ЭЗЗ в точке Дирака.

Теоретические оценки модуляции величины ЭЗЗ в точке Дирака при вариации градиента поверхностного потенциала. Ниже будут представлены результаты расчетов методом ТФП зависимости величины ЭЗЗ от внешнего электрического поля, приложенного перпендикулярно поверхности. Данное электрическое поле (и соответствующий градиент поверхностного потенциала) рассматривается в качестве обобщенного параметра влияния различного типа заряженных поверхностных дефектов, без детализации факторов, вызывающих эти изменения. Известно, что на поверхности кристалла вследствие обрыва периодической решетки формируется поверхностный потенциал и соответствующее электрическое поле, проникающее вглубь кристалла. Напряженность поля (или соответствующая величина градиента поверхностного потенциала) может изменяться в зависимости от изменений локальной работы выхода системы, а также от эффективной плотности нескомпенсированных дефектов на поверхности и в приповерхностной области. Поэтому величина градиента поверхностного потенциала может оказаться различной для разных экспериментально измеряемых образцов. И более того, локальный градиент поверхностного потенциала может изменяться и для различных областей одного и того же образца. Это может приводить к тому, что величина ЭЗЗ для различных образцов $MnBi_2Te_4$ может значительно изменяться.

На рисунке 4а–с представлены результаты расчетов электронной и спиновой структуры $MnBi_2Te_4$ для нескольких различных значений напряженности электрического поля, приложенного перпендикулярно поверхности, и соответствующего градиента поверхностного потенциала (-0.45 , 0 и $+0.3$ В/Å). Левые и правые панели на каждом вкладыше показывают спиновую структуру топологических состояний со спиновой ориентацией перпендикулярно поверхности (out-of-plane) и вдоль поверхности (in-plane), соответственно. Противоположные направления спиновой компоненты (S_Z и $-S_Z$) и (S_X и $-S_X$) для ориентации перпендикулярно и вдоль поверхности показаны красными и синими цветами, соответственно.

Соответствующие изменения величины ЭЗЗ в точке Дирака при вариации градиента поверхностного потенциала (или соответствующего заряда, локализованного на поверхности) в диапазоне напряженности электрического поля от -0.45 В/Å до $+0.45$ В/Å, показаны на рис. 4d [48, 49]. Представленные дисперсионные зависимости ТПС наглядно демонстрируют изменения величины ЭЗЗ в точке Дирака в зависимости от величины напряженности электрического поля (градиента поверхностного потенциала) или поверхностного заряда. При приложении электрического поля “отрицательной” направленности (или при изменении хода поверхностного потенциала, соответствующего увеличению отрицательного заряда на поверхности) величина ЭЗЗ может уменьшаться практически до нуля при значении градиента поверхностного потенциала поля -0.45 В/Å. Для противоположного направления приложенного электрического поля величина ЭЗЗ сначала увеличивается с 81 до 89 мэВ, а затем также начинает уменьшаться, хотя и гораздо медленнее, чем для случая электрических полей “отрицательной” направленности. Аналогичные изменения в величине ЭЗЗ показывают расчеты методом ТФП зависимости ЭЗЗ от величины спин-орбитального взаимодействия приповерхностных атомов Te и Bi [49]. Потенциально данный эффект может сосуществовать с зарядовыми эффектами и оказывать влияние на электронную структуру ТПС.

Для получения более конкретного ответа на вопрос, какими факторами могут быть обусловлены представленные изменения в величине ЭЗЗ в точке Дирака, на рис. 4e, f показаны результаты расчетов пространственного перераспределения ТПС верхней и нижней частей дираковского конуса (т. е. изменение их локализации) при изменении знака и напряженности приложенного электрического поля. В работе [47] высказывалась идея, что перераспределение ТПС в область второго блока с противоположными направлениями магнитных моментов на атомах приводит к уменьшению эффективного магнитного момента, действующего на ТПС и, как результат, уменьшению величины ЭЗЗ в точке Дирака.

Из анализа данных, представленных на рис. 4e, f, можно сделать вывод, что внешнее электрическое поле действительно существенно влияет на перераспределение локализации ТПС между первым и вторым блоками, причем по-разному для состояний верхней и нижней частей дираковского конуса. Состояния верхней части дираковского конуса локализованы, в основном, в верхнем (поверхностном) блоке при всех приложенных электрических полях. В то время как

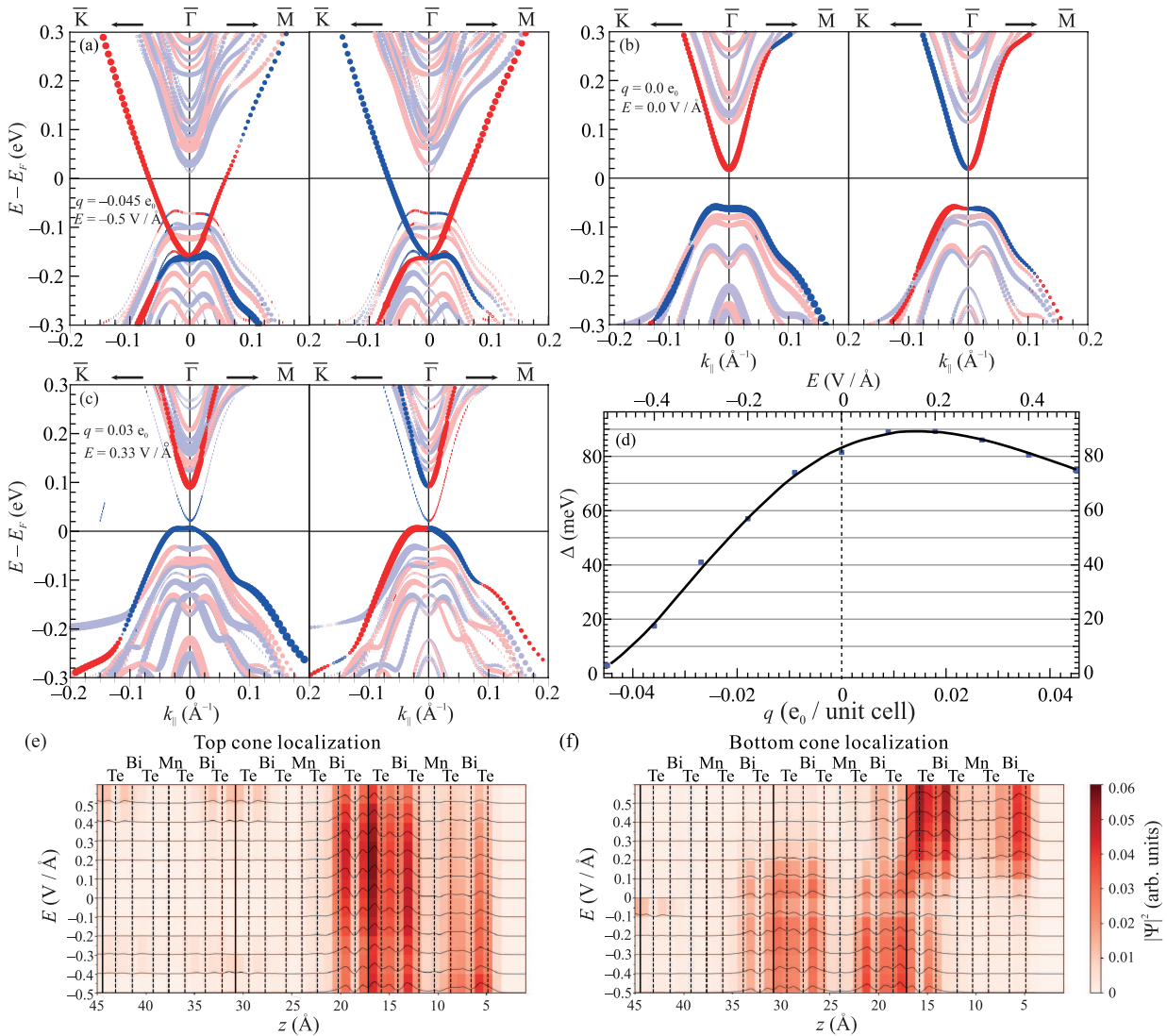


Рис. 4. (Цветной онлайн) (а)–(с) – Рассчитанные методом ТФП дисперсионные зависимости ТПС при приложении различного по величине электрического поля перпендикулярно поверхности. Левая и правая панели показывают спиновую структуру ТПС в проекции на направление перпендикулярно (out-of-plane) и вдоль (in-plane) поверхности. Размер кружков соответствует значению проекции вектора спина, направление +/- показано цветом. (d) – Зависимость изменения величины ЭЗЗ в точке Дирака от величины поверхностного заряда (нижняя ось) и градиента поверхностного потенциала (верхняя ось). (e), (f) – Изменение локализации квадрата волновой функции нижней (f) и верхней (e) частей дираковского конуса в области первых трех блоков при вариации напряженности электрического поля от -0.45 до $+0.45$ В/Å. Взято из работ [48, 49]

локализация состояний нижней части конуса распространяется значительно глубже, в область второго более низко лежащего блока. Это связано с их частичной гибридизацией с состояниями валентной зоны, что может быть подтверждено некоторым искажением дисперсионных зависимостей для состояний нижней части дираковского конуса (см. рис. 4а–с). При приложении электрического поля “отрицательной” направленности локализация ТПС нижней ча-

сти дираковского конуса сдвигаются в сторону второго блока, что действительно может приводить к компенсации эффективного магнитного момента, воздействующего в общем на ТПС, и как результат, к уменьшению величины ЭЗЗ в точке Дирака. При этом для электрического поля “положительной” направленности топологические состояния обеих частей дираковского конуса локализованы, в основном, в области верхнего блока. Компенсирующее влияние

магнитных моментов от второго блока на ТПС в этом случае минимизируется, что и обуславливает максимальную величину ЭЗЗ в точке Дирака. Однако стоит отметить, что при этом изменения в локализации ТПС происходят существенно резче, чем изменения в величине ЭЗЗ в точке Дирака. Проблема влияния приложенного электрического поля (и формируемого градиента потенциала) на соответствующую модификацию величины ЭЗЗ в точке Дирака является сложной проблемой и требует дальнейшего более детального анализа. Однако при этом представленные результаты показывают возможность модуляции величины ЭЗЗ в точке Дирака приложенным электрическим полем.

$(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$. Детальный анализ электронной структуры ТПС магнитных ТИ семейства $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$ для $m = 1, 2, 3$ представлен в работах [41, 58–64]. Структура ТПС для данного семейства ТИ существенно отличается для различных поверхностных терминаций, когда на поверхность выходит либо магнитный блок MnBi_2Te_4 , либо немагнитный блок Bi_2Te_3 . Причем ситуация различна для случаев, когда на поверхности находится один немагнитный блок ($m = 1$), два ($m = 2$) и т.д. Для терминаций с одним или двумя немагнитными блоками на поверхности ($m = 2$) наблюдается существенное различие в энергиях связи для точки Дирака, а также более сложная электронная структура ТПС и состояний валентной зоны и зоны проводимости [41, 58–63, 65]. В качестве иллюстрации на рис. 5 представлены изменения структуры ТПС для различных поверхностных терминаций для ТИ MnBi_4Te_7 и $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ [41]. Подобная структура ТПС для данных материалов наблюдается также в работах [58–65].

В случае терминации поверхности магнитным блоком MnBi_2Te_4 электронная структура ТПС для различных ТИ $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$ приблизительно похожа, см. рис. 5а, d, но значительно отличается от MnBi_2Te_4 ($m = 0$) (рис. 3). Данные изменения в первую очередь проявляются в появлении дополнительных ветвей состояний зоны проводимости справа и слева от состояний дираковского конуса.

Предполагается, что появление этих состояний обусловлено гибридизацией состояний дираковского конуса в верхнем семислойнике MnBi_2Te_4 с объемными состояниями из нижележащего немагнитного блока Bi_2Te_3 [41, 58–63, 65]. Причем эти состояния появляются при фотоэлектронных измерениях с использованием лазерного излучения [58, 59–61, 63–65], которые характеризуются значительно большей глубиной выхода фотоэлектронов, что позволяет чув-

ствовать вклад в фотоэлектронные спектры и второго более нижележащего немагнитного блока. При измерениях с использованием синхротронного излучения данные состояния проявляются в значительно меньшей степени [41]. При этом положение точки Дирака (E_D) практически не меняется. Помимо этого, эффекты гибридизации особенно ярко проявляются для случаев поверхностной терминации одним блоком Bi_2Te_3 (рис. 5b, e) путем формирования ярко выраженной запрещенной гибридизационной зоны в верхней части дираковского конуса (энергия связи около 0.3 эВ), в местах пересечения с валентными состояниями нижележащего магнитного блока. В случае поверхностной терминации двумя немагнитными блоками данные гибридизационные эффекты проявляются уже в меньшей степени.

Что касается возможности открытия ЭЗЗ в точке Дирака для данного семейства ТИ, существуют как работы, предполагающие отсутствие ЭЗЗ в точке Дирака [59–61], так и работы, утверждающие обратное [41, 58, 62–65]. На рисунке 6а, b представлены детальные дисперсионные зависимости ТПС, измеренные методом ФЭСУР с высоким энергетическим и угловым разрешением для различных образцов MnBi_4Te_7 с магнитной терминацией, для которой ожидаются наиболее явно выраженные изменения ЭЗЗ в точке Дирака. На данном рисунке, подобно рис. 3, показаны и проанализированы дисперсионные зависимости ТПС. Представленные данные показывают, что магнитная терминация MnBi_4Te_7 характеризуется наличием ЭЗЗ в точке Дирака, так же, как это имеет место и для поверхности MnBi_2Te_4 . При этом на поверхности MnBi_4Te_7 величина ЭЗЗ в точке Дирака также может изменяться для различных образцов. Для образцов, представленных на рис. 6, были выявлены ЭЗЗ размером 55 и 34 мэВ, аналогично как и для различных образцов MnBi_2Te_4 . При этом ненулевая интенсивность фотоэмиссионного сигнала внутри ЭЗЗ в точке Дирака, которые можно выделить для спектра с ЭЗЗ, равной 34 мэВ, предполагает также возможность формирования дисперсионных зависимостей ТПС без ЭЗЗ подобно [59–61]).

Таким образом, из представленных данных можно сделать вывод, что для образцов ТИ из серии $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$ также возможно открытие энергетической ЭЗЗ в точке Дирака. Причем величина ЭЗЗ может варьироваться в пределах от 55 до 35 мэВ (и ниже), в зависимости от различных факторов, в том числе, возможно в зависимости от концентрации и типа дефектов на поверхности, как и в случае MnBi_2Te_4 .

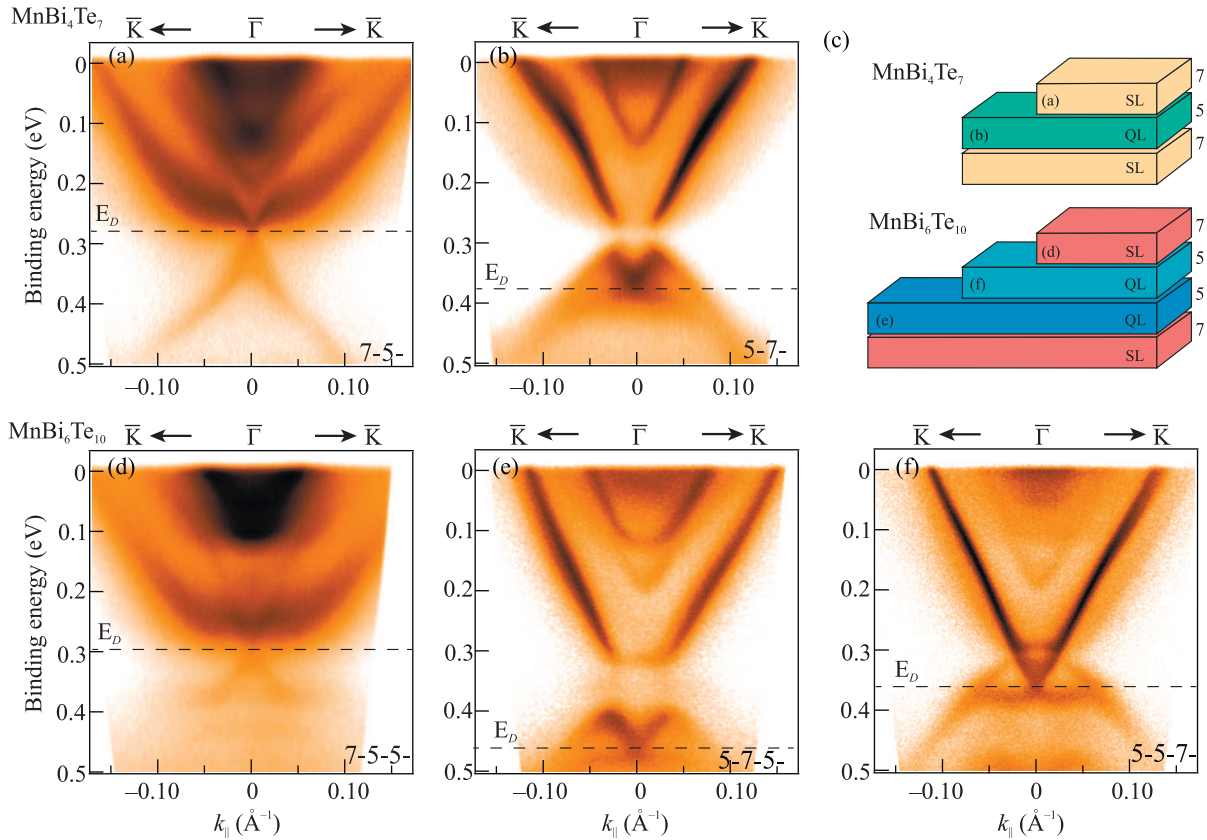


Рис. 5. (Цветной онлайн) Дисперсионные зависимости ТПС для различных терминаций поверхности MnBi_4Te_7 – (a), (b) и $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ – (d), (e), (f), измеренные ФЭСУР при $h\nu = 6.3$ эВ. (c) – Схематические представления поверхности образцов MnBi_4Te_7 и $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ с различными терминациями. Взято из работы [41]

Заключение. Семейство ТИ $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$, $m \geq 0$, имеет общий тип кристаллической структуры, состоящей из магнитных блоков MnBi_2Te_4 , чередующихся различным числом (m) немагнитных блоков Bi_2Te_3 . Подобная конструкция блоков позволяет управлять магнитными свойствами материала. Так для соединений с $m = 0, 1, 2$ (MnBi_2Te_4 , MnBi_4Te_7 , $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$) связь между магнитными слоями имеет трехмерный антиферромагнитный характер. При этом величина обменного взаимодействия между блоками падает с увеличением m , что сказывается на температуре магнитного упорядочения (температура Нееля, T_N), которая максимальна для $m = 0$ ($T_N = 24.5$ К), а для $m = 1$ и 2 уже составляет 13 и 11 К соответственно. При $m \geq 3$ блоки MnBi_2Te_4 практически не взаимодействуют и, по сути, оказываются двухмерными магнетиками.

Электронная структура данного семейства характеризуется одним конусом Дирака топологических поверхностных состояний, вид и свойства которого зависят от числа промежуточных немагнитных блоков m и от магнитной/немагнитной терминации по-

верхности при $m > 0$. Для немагнитной терминации форма ТПС с увеличением m ожидаемо стремится к виду ТПС, характерному для Bi_2Te_3 , и уже практически совпадает с ней в случае терминации 5-5-7- для $m = 2$. Для немагнитных терминаций типа 5-7- наблюдаются значительные отличия за счет влияния состояний нижележащего магнитного блока и наблюдаемых гибридационных эффектов. В случае магнитной терминации поверхности возможно открытие запрещенной зоны в точке Дирака. Для MnBi_2Te_4 она максимальна и ожидается на уровне 80–90 мэВ, согласно оценкам методом ТФП. Для $m = 1$ и 2 расчетные оценки также дают значение ЭЗЗ на уровне 70 мэВ, что вполне ожидаемо, так как наибольшее влияние на ТПС оказывает магнетизм верхнего блока.

Однако экспериментально показана существенная неоднозначность ЭЗЗ для $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$. Так для $m = 0$ возможны изменения ЭЗЗ в диапазоне практически от 0 и до 70 мэВ для различных образцов. Для $m = 1$ также наблюдается вариация величины ЭЗЗ для разных точек на образце (рис. 6).

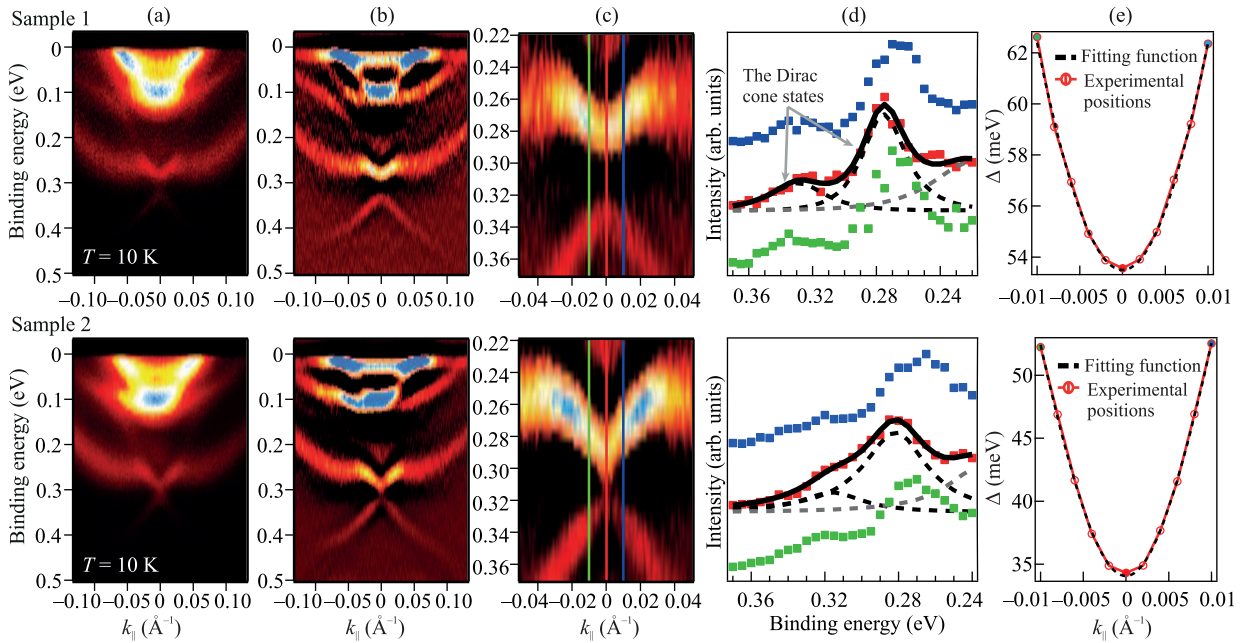


Рис. 6. (Цветной онлайн) (a) – Дисперсионные зависимости ТПС, измеренные для MnBi_4Te_7 методом ФЭСУР с $h\nu = 6.3$ эВ ($T = 10$ К) для образцов с различной величиной ЭЗЗ в точке Дирака, представленные в виде d^2N/dE^2 для лучшей визуализации, в полном энергетическом интервале (b) и в области точки Дирака (c). (d) – Спектр, полученный в Γ точке (т.е. при $k_{\parallel} = 0$) – красные символы, и вне Γ точки – зеленые и синие символы. Пунктирными линиями представлено разложение на спектральные компоненты для состояний конуса Дирака. (e) – Зависимость расщепления между состояниями верхней и нижней части конуса Дирака от величины волнового вектора k_{\parallel}

На данный момент основной причиной, определяющей неоднозначность величины ЭЗЗ, считается наличие естественных точечных и/или макроскопических дефектов кристаллической структуры. Данные дефекты могут влиять на магнитное упорядочение (например, за счет замещения атомов Bi на атомы Mn для магнитных блоков), на локализацию ТПС (за счет изменения межслоевых и межблоковых (ван-дер-ваальсовых) расстояний) или появление нескомпенсированного заряда на поверхности. Расчеты методом ТФП для MnBi_2Te_4 показали существенное влияние заряда на поверхности или приложенного электрического поля на величину ЭЗЗ в точке Дирака, которая может изменяться практически от 0 и до 90 мэВ в зависимости от значения заряда или поля.

В целом, несмотря на ряд актуальных проблем, изучение и совершенствование собственных магнитных топологических изоляторов является важной задачей современной физики твердого тела. Перестраиваемые магнитные фазы в семействе $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$ при изменении m и модуляция ЭЗЗ в точке Дирака предоставляют возможность проектирования перспективных систем для эффективной реализации высокотемпературного

квантового аномального эффекта Холла, состояния аксионного изолятора, а также для развития новых направлений в антиферромагнитной и двухмерной спинтронике и наноэлектронике.

Работа выполнена в рамках финансовой поддержки Российского научного фонда (РНФ) (грант # 18-12-00062).

1. X. L. Qi, T. L. Hughes, S.-Ch. Zhang, Phys. Rev. B **78**, 195424 (2008).
2. X.-L. Qi and S.-C. Zhang, Rev. Mod. Phys. **83**, 1057 (2011).
3. C. Z. Chang, J. Zhang, X. Feng et al. (Collaboration), Science **340**, 167 (2013).
4. Y. Tokura, K. Yasuda, and A. Tsukazaki, Nat. Rev. Phys. **1**, 126 (2019).
5. C.-Z. Chang, W. Zhao, D. Y. Kim, H. Zhang, B. A. Assaf, D. Heiman, S.-C. Zhang, C. Liu, M. Chan, and J. Moodera, Nat. Mater. **14**, 473 (2015).
6. J. Wang, B. Lian, X. Qi, and S.-C. Zhang, Phys. Rev. B **92**, 081107 (2015).
7. Y. Deng, Y. Yu, M. Shi, Z. Guo, Z. Xu, J. Wang, X.-H. Chen, and Yu. Zhang, Science **367**, 895 (2020).
8. A. Essin, J. Moore, and D. Vanderbilt, Phys. Rev. Lett. **102**, 146805 (2009).

9. Z. Liu and J. Wang, *Phys. Rev. B* **101**, 205130 (2020).
10. S. Coh, D. Vanderbilt, A. Malashevich, and I. Souza, *Phys. Rev. B* **83**, 085108 (2011).
11. M. Gibertini, M. Koperski, A. Morpurgo, and K. Novoselov, *Nat. Nanotechnol.* **14**, 408 (2019).
12. K. Burch, D. Mandrus, and J. Park, *Nature* **563**, 47 (2018).
13. X. Lin, W. Yang, K. Wang, and W. Zhao, *Nat. Electron.* **2**, 274 (2019).
14. T. Jungwirth, X. Marti, P. Wadley, and J. Wunderlich, *Nat. Nanotechnol.* **11**, 231 (2016).
15. L. Smejkal, Y. Mokrousov, B. Yan, and A. H. MacDonald, *Nat. Phys.* **14**, 242 (2018).
16. V. Baltz, A. Manchon, M. Tsoi, T. Moriyama, T. Ono, and Y. Tserkovnyak, *Rev. Mod. Phys.* **90**, 015005 (2018).
17. Y. Chen, J. Chu, J. Analytis et al. (Collaboration), *Nat. Phys.* **329**, 659 (2010).
18. A. Shikin, A. Rybkina, D. Estyunin et al. (Collaboration), *Phys. Rev. B* **97**, 245407 (2018).
19. A. Shikin, D. Estyunin, Yu. Surnin, A. V. Koroleva, E. V. Shevchenko, K. A. Kokh, O. E. Tereshchenko, S. Kumar, E. F. Schwier, K. Shimada, T. Yoshikawa, Y. Saitoh, Y. Takeda, and A. Kimura, *Sci. Rep.* **18**, 4813 (2019).
20. J. Checkelsky, J. Ye, Y. Onose, Y. Iwasa, and Y. Tokura, *Nat. Phys.* **8**, 729 (2012).
21. J. Henk, A. Ernst, S. Eremeev, E. V. Chulkov, I. V. Maznichenko, and I. Mertig, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 206801 (2012).
22. Y. Hor, P. Roushan, H. Beidenkopf, J. Seo, D. Qu, J. G. Checkelsky, L. A. Wray, D. Hsieh, Y. Xia, S.-Y. Xu, D. Qian, M. Z. Hasan, N. P. Ong, A. Yazdani, and R. J. Cava, *Phys. Rev. B* **81**, 195203 (2010).
23. S. Filnov, Yu. Surnin, A. Koroleva, I. I. Klimovskikh, D. A. Estyunin, A. Yu. Varykhalov, K. A. Bokai, K. A. Kokh, O. E. Tereshchenko, V. A. Golyashov, E. V. Shevchenko, and A. M. Shikin, *JETP* **129**, 404 (2019).
24. I. Lee, C. Kim, J. Lee, S. Billinge, R. Zhong, J. Schneeloch, T. Liu, T. Valla, J. Tranquada, G. Gu, and J. Davis, *PNAS* **112**(5), 1316 (2015).
25. A. K. Kaveev, S. M. Sutorin, V. A. Golyashov, K. A. Kokh, S. V. Eremeev, D. A. Estyunin, A. M. Shikin, A. V. Okotrub, A. N. Lavrov, E. F. Schwier, and O. E. Tereshchenko, *Phys. Rev. Materials* **5**, 124204 (2021).
26. T. Makarova, D. Estyunin, S. Filnov et al. (Collaboration), *JETP* **161**(3), 1 (2022).
27. M. Otrokov, I. Klimovskikh, H. Bentmann et al. (Collaboration), *Nature* **576**, 416 (2019).
28. D. Zhang, M. Shi, T. Zhu, D. Xing, H. Zhang, and J. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 206401 (2019).
29. J. Li, Y. Li, S. Du, Z. Wang, B.-L. Gu, S.-C. Zhang, K. He, W. Duan, and Y. Xu, *Sci. Adv.* **15**, eaaw5685 (2019).
30. Y. Gong, J. Guo, J. Li et al. (Collaboration), *Chinese Phys. Lett.* **36**, 076801 (2019).
31. S. Lee, Y. Zhu, Y. Wang et al. (Collaboration), *Phys. Rev. Research* **1**, 012011 (2019).
32. Z. Aliev, I. Amiraslanov, D. Nasonova, A. Shevelkov, N. Abdullayev, Z. Jahangirli, E. Orujlu, M. Otrokov, N. Mamedov, M. Babanly, and E. Chulkov, *J. Alloys Compd.* **789**, 443 (2019).
33. Y. Hao, P. Liu, Y. Feng et al. (Collaboration), *Phys. Rev. X* **9**, 041038 (2019).
34. Y. Chen, L. Xu, J. Li et al. (Collaboration), *Phys. Rev. X* **9**, 041040 (2019).
35. P. Swatek, Y. Wu, L. Wang, K. Lee, B. Schrunk, J. Yan, and A. Kaminski, *Phys. Rev. B* **101**, 161109 (2020).
36. K. Okamoto, K. Kuroda, H. Miyahara, K. Miyamoto, T. Okuda, Z. S. Aliev, M. B. Babanly, I. R. Amiraslanov, K. Shimada, H. Namatame, M. Taniguchi, D. A. Samorokov, T. V. Menshchikova, E. V. Chulkov, and A. Kimura, *Phys. Rev. B* **86**, 195304 (2012).
37. K. Kuroda, H. Miyahara, M. Ye et al. (Collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **108**, 206803 (2012).
38. T. Menshchikova, S. Eremeev, and E. Chulkov, *Appl. Surf. Sci.* **267**, 1 (2013).
39. J. Wu, F. Liu, M. Sasase, K. Ienaga, Y. Obata, R. Yukawa, K. Horiba, H. Kumigashira, S. Okuma, T. Inoshita, and H. Hosono, *Sci. Adv.* **5**, eaax9989 (2019).
40. C. Hu, K. Gordon, P. Liu et al. (Collaboration), *Nat. Commun.* **11**, 97 (2020).
41. I. Klimovskikh, M. Otrokov, D. Estyunin et al. (Collaboration), *npj Quantum Mater.* **5**, 54 (2020).
42. Z. Jahangirli, E. Alizade, Z. Aliev, M. Otrokov, N. Ismayilova, S. Mammadov, I. Amiraslanov, N. Mamedov, G. Orudzhev, M. Babanly, A. Shikin, and E. Chulkov, *J. Vacuum Sci. Technol. B* **37**, 062910 (2019).
43. R. Vidal, A. Zeugner, J. Facio et al. (Collaboration), *Phys. Rev. X* **9**, 041065 (2019).
44. J. Yan, Q. Zhang, T. Heitmann, Z. Huang, K. Chen, J.-G. Cheng, W. Wu, D. Vaknin, B. Sales, and R. McQueeney, *Phys. Rev. Materials* **3**, 064202 (2019).
45. R. Mong, A. Essin, and J. Moore, *Phys. Rev. B* **81**, 245209 (2010).
46. D. Estyunin, I. Klimovskikh, A. Shikin, E. F. Schwier, M. M. Otrokov, A. Kimura, S. Kumar, S. O. Filnov, Z. S. Aliev, M. B. Babanly, and E. V. Chulkov, *APL Materials* **8**, 021105 (2020).
47. A. Shikin, D. Estyunin, I. Klimovskikh et al. (Collaboration), *Sci. Rep.* **10**, 13226 (2020).
48. A. Shikin, D. Estyunin, N. Zaitsev et al. (Collaboration), *Phys. Rev. B* **104**, 115168 (2021).

49. A. Shikin, D. Estyunin, N. Zaitsev et al. (Collaboration), *JETP* **161**, 126 (2022).
50. M. Garnica, M. Otrokov, P. Casado Aguilar et al. (Collaboration), *Quantum Materials* **7**, 7 (2022).
51. D. Nevola, H. Li, J. Yan, R. Moore, H.-N. Lee, H. Miao, and P. Johnson, *Phys. Rev. Lett.* **125**, 117205 (2020).
52. C. Yan, S. Fernandez-Mulligan, R. Mei, S. Lee, N. Protic, R. Fukumori, B. Yan, C. Liu, Z. Mao, and S. Yang, *Phys. Rev. B* **104**, L041102 (2021).
53. H. Sun, B. Xia, Z. Chen, Y. Zhang, P. Liu, Q. Yao, H. Tang, Y. Zhao, H. Xu, and Q. Liu, *Phys. Rev. Lett.* **123**, 096401 (2019).
54. C. Hu, L. Ding, K. Gordon et al. (Collaboration), arXiv:910.12847 (2019).
55. A. Zeugner, F. Nietschke, A. Wolter et al. (Collaboration), *Chem. Mater.* **31**, 2795 (2019).
56. B. Li, J. Yan, D. Pajeroski, E. Gordon, A.-M. Nedic, Y. Sizyuk, L. Ke, P. Orth, D. Vaknin, and R. McQueeney, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 167204 (2020).
57. S. Ereemeev, M. Otrokov, and E. Chulkov *J. Alloys Compd.* **709**, 172 (2017).
58. R. Vidal, H. Bentmann, J. Facio et al. (Collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **126**, 176401 (2021).
59. Y. Hu, L. Xu, M. Shi, A. Luo, S. Peng, Z. Wang, J. Ying, T. Wu, Z. Liu, C. Zhang, Y. Chen, G. Xu, X.-H. Chen, and J.-F. He, *Phys. Rev. B* **101**, 161113(R) (2020).
60. X.-M. Ma, Z. Chen, E. Schwier et al. (Collaboration), *Phys. Rev. B* **102**, 245136 (2020).
61. L. Xu, Y. Mao, H. Wang et al. (Collaboration), *Sci. Bull.* **65**, 2086 (2020).
62. K. Gordon, H. Sun, C. Hu, A. Linn, H. Li, Y. Liu, P. Liu, S. Mackey, Q. Liu, N. Ni, and D. Dessau, arXiv:1910.13943 (2019).
63. S. Tian, S. Gao, S. Nie et al. (Collaboration), *Phys. Rev. B* **102**, 035144 (2020).
64. R. Lu, H. Sun, S. Kumar et al. (Collaboration), *Phys. Rev. X* **11**, 011039 (2021).
65. X. Wu, J. Li, X. Ma et al. (Collaboration), *Phys. Rev. X* **10**, 031013 (2020).