

Сведения о выполненных работах в 2020 году  
по проекту «**Управление электронными свойствами топологически  
нетривиальных фаз**»,  
поддержанному Российским научным фондом  
Соглашение № 18-12-00169

Руководитель Еремеев Сергей Владимирович, д-р физ.-мат. наук

Теоретически исследованы поверхностные электронные состояния, специфичные для магнитных топологических изоляторов. Изучение проводилось в рамках континуального подхода на основе гамильтониана для квази-релятивистских фермионов. Неоднородная намагниченность на поверхности топологического изолятора моделировалась доменными стенками с различными векторными и пространственными текстурами. Именно, были изучены спектральные характеристики, зависимости от спиновой степени свободы и пространственная локализация низкоэнергетических поверхностных электронных состояний, формирующихся на квази-одномерных доменных стенках с различными конфигурациями: резкие и плавные, коллинеарные и неколлинеарные. Показано, что при любой ориентации оси легкой намагниченности антифазные доменные стенки порождают топологически защищенные киральные состояния дираковского типа с линейной дисперсией. Однако в зависимости от ориентации анизотропии эти состояния меняют свою групповую скорость и направление спиновой поляризации. Поэтому в случае анизотропии типа легкая плоскость реализуется, как мы предсказываем, бездисперсионное состояние, поляризованное по спине вдоль нормали к поверхности (так называемая «плоская зона» в энергетическом спектре). Мы показали, что магнитные доменные стенки со сложной внутренней текстурой, например, неелевского или блоховского типа, также несут топологические состояния, хотя спектр и спиновая структура последних могут заметно модифицироваться по сравнению со случаем изинговской стенки. Кроме того, когда эффективная ширина стенки превышает характерный масштаб локализации связанного состояния, в поверхностном спектре одночастичных возбуждений дополнительно появляются нетопологические щелевые ветви. Мы продемонстрировали, что внешнее магнитное поле можно использовать, как инструмент для управления поведением электронных состояний, связанных с доменными стенками. В многодоменной ситуации (которая аппроксимируется в нашем подходе периодическим рядом доменных стенок) в спектре вблизи нулевой энергии открывается энергетическая щель, экспоненциально спадающая с расстоянием между соседними стенками, и происходит перераспределение спектральной плотности вдали от нуля энергии. Хотя используемый нами формализм применим для описания топологических изоляторов, обладающих магнитным порядком различного происхождения, особое внимание мы уделили механизму возникновения состояний, индуцированных доменными стенками на поверхности собственного антиферромагнитного топологического изолятора. Результаты, полученные аналитическими методами, хорошо согласуются с результатами, полученными с помощью численного формализма, базирующегося на

приближении сильной связи. Мы качественно оценили возможный вклад исследованных состояний в транспортные и магнетотранспортные явления в магнитных гетероструктурах на основе топологических изоляторов.

Проведены исследования магнитного упорядочения и топологии в системах на основе антиферромагнитного топологического изолятора  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ . Во-первых, для  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ , где многочисленные экспериментальные работы, выполненные за последний год продемонстрировали, что магнитно-индуцированная щель в Дираковском состоянии может варьироваться в широком интервале значений, нами было предложено теоретическое объяснение модуляции щели на основе модели учитывающей структурные планарные и точечные дефекты. Проведённые расчеты зависимости щели от наличия дефектов выявили возможность наблюдения в эксперименте щели как большей теоретически предсказанной, так и меньшей, вплоть до нулевого значения. Кроме объёмных и двумерных систем на основе  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  ранее нами была теоретически предсказана возможность формирования планарных гетероструктур  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4/\text{Bi}_2\text{Te}_3$ , а также гетероструктур, содержащих более толстые слои  $\text{MnTe}$  в верхнем блоке гетероструктуры. В этом году удалось реализовать такие многослойные гетероструктуры экспериментально: были получены поверхностные магнитные слои, которые представляют собой смесь гетероструктур  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4/\text{Bi}_2\text{Te}_3$  и  $\text{Mn}_4\text{Bi}_2\text{Te}_7/\text{Bi}_2\text{Te}_3$ . Наблюдаемая электронная структура хорошо согласуется проведенными в рамках проекта первопринципными зонными расчётами. Предложены семейства соединений со смешанной слоисто-блочной структурой на основе блоков антиферромагнитного топологического изолятора  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  и топологического изолятора  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ , образующих гомологический ряд соединений  $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$  и изоструктурных соединений  $(\text{MnSb}_2\text{Te}_4)(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_m$  на основе  $\text{MnSb}_2\text{Te}_4$ . Во-первых, вопреки предыдущим предсказаниям, что  $\text{MnSb}_2\text{Te}_4$  является тривиальным изолятором мы показали, что  $\text{MnSb}_2\text{Te}_4$  близок к точке топологического перехода, и высокая точность оптимизации структуры важна для правильного предсказания его топологической фазы. Согласно нашим DFT расчетам для серий соединений  $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$  и  $(\text{MnSb}_2\text{Te}_4)(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_m$  характерно антиферромагнитное упорядочение, при этом межслоевое обменное взаимодействие связывающего антиферромагнитно ферромагнитно упорядоченные слои Mn, постепенно уменьшается при увеличении  $m$  от 0 до 2. Для  $m=3$  и больших межслоевой обмен практически исчезает. Проведенные в рамках теории функционала электронной плотности расчеты поверхностной электронной структуры соединений  $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$  для разных окончаний поверхности скола (0001) показали, что дисперсия поверхностного спектра сильно зависит от окончания поверхности, при этом также наблюдается изменение величины магнитной щели. Рассчитанные спектры боковой поверхности, сохраняющей S-симметрию, показали наличие безщелевого состояния в спектре, что является характеристикой AFM TI. Полученные результаты открывают возможности для реализации множества топологически нетривиальных состояний в семействах  $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$  и  $(\text{MnSb}_2\text{Te}_4)(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_m$ .

В продолжение изучения электронной структуры немагнитных слоистых топологических изоляторов с различной стехиометрией проведенных в предыдущие годы выполнения проекта была детально исследована электронная структура объема и поверхности  $\text{GeSb}_2\text{Te}_4$ . Была проанализирована зависимость ширины объемной щели и топологии от вида обменно-корреляционного функционала. Показано, что независимо от вида функционала топологический инвариант, рассчитанный с помощью метода основанного на отслеживании эволюции гибридных функций Ванье, является не нулевым. Следствием инвертированности объемной щели является наличие безщелевого поверхностного стояния с линейной дисперсией. Проанализирована эволюция электронного спектра объема в зависимости от одноосной деформации в пределах от -2% до 2% и построена фазовая диаграмма, отражающая условия реализации топологического состояния.

Проведенное в приближении случайных фаз изучение электромагнитных коллективных возбуждений в дираковских полуметаллах, помещенных в квантующее магнитное поле, показало, что вблизи характерного интервала частот, определяемого отношением скорости Ферми к магнитной длине, при конечном значении волнового вектора существует серия новых квантовых коллективных колебаний. Анализ дисперсионных уравнений для продольных и поперечных волн вблизи границ зон в областях затухания Ландау приводит к выводу о существовании новых типов циркулярных лево-поляризованных коллективных возбуждений. Выявлены особенности универсального уширения циклотронного поглощения при изменении магнитного поля в системах с линейной дисперсией электронного спектра. Использование полученного спектра позволяет предсказать нам также ряд осцилляционных и резонансных эффектов в области низкочастотных магнито-акустических явлений.

В рамках теории функционала электронной плотности, рассчитана электронная структура и орбитальный состав тонких пленок соединений  $\text{Bi}_2\text{TeI}$  и  $\text{Bi}_2\text{TeBr}$ , характеризующихся наличием топологически нетривиальных состояний в объемных кристаллах и предложена инверсионно-несимметричная двумерная гетероструктура на основе тонких пленок данных материалов, в которой вблизи уровня Ферми за счет нарушения инверсионной симметрии, возникают спин-поляризованные состояния. Проведен анализ влияния различных обменно-корреляционных потенциалов на структурные параметры и электронную структуру данной пленки. Предложен способ, с помощью которого можно добиться получения спин-поляризованного тока в данной гетероструктуре с различным направлением спина. Исследована изотропность электронной структуры пленки вблизи уровня Ферми, что напрямую влияет на пригодность для практических приложений.