

Сведения о выполненных работах в 2021 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

В течение года работа, направленная на теоретическое исследование электронной структуры топологически нетривиальных фаз велась по нескольким направлениям. Это изучение влияния пространственных неоднородностей поверхностного потенциала, возникающего за счет распределения заряженных антиузельных дефектов, и формирование магнитных доменных стенок в антиферромагнитном топологическом изоляторе  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ . Изучение топологии электронных спектров тонких плёнок  $\text{MnSb}_2\text{Te}_4$  и пленок более сложных соединений серии  $(\text{MnSb}_2\text{Te}_4)(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_n$  при разных типах намагниченности – в собственном антиферромагнитном состоянии и во внешнем магнитном поле. Изучение электронной структуры двумерных магнитных тонких плёнок на основе структурных блоков магнитного изолятора  $\text{MnBi}_2\text{Se}_4$  и топологического изолятора  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  при антипараллельной и параллельной магнетизации в слоях  $\text{MnBi}_2\text{Se}_4$ . Изучение электронной структуры топологических изоляторов поверхностно-допированных кобальтом. Исследование электронных свойств гетероструктуры, состоящей из подложки  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  и тонкого поверхностного слоя изолятора с гигантским рашбовским расщеплением  $\text{BiTeI}$ , а также гетероструктур на основе  $\text{Bi}_2\text{TeI}$  и  $\text{Bi}_2\text{TeBr}$ , содержащих слои  $\text{BiTeI}$  и родственного соединения  $\text{BiTeBr}$  и бислои висмута. Также исследована электронная структура интерфейса сверхпроводящей пленки свинца, от одного до трёх монослоёв, и топологического изолятора  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ .

Было установлено, что электростатический поверхностный потенциал определяет величину и знак эффективного обменного поля, влияющего на поверхностные электронные состояния в собственных антиферромагнитных топологических изоляторах (АФМ ТИ). Пространственные неоднородности поверхностного потенциала, например, связанные с флуктуациями распределения заряженных антиузельных дефектов  $\text{BiMn}$  и  $\text{MnBi}$  в соединении  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ , могут провоцировать возникновение доменной структуры обменного поля. В модели уединённой жёсткой доменной стенки показано, что помимо модуляции поверхностной обменной щели или смещения двумерного дираковского конуса в импульсном пространстве возникает связанное одномерное бесщелевое состояние, индуцированное границей между антифазными доменами. Аналитически описаны основные характеристики связанного состояния, такие как энергетический спектр, спиновая поляризация и пространственная локализация, и их зависимости от ориентации оси магнитной анизотропии. Эти зависимости подтверждаются детальными расчётами в приближении сильной связи. Найденные состояния имеют топологическое происхождение и обладают свойством киральности. Предсказано существование «тяжелого» фермиона (бездисперсионной спин-поляризованной

квазичастицы) на магнитной доменной стенке на поверхности планарного АФМ ТИ, что обусловлено киральной симметрией системы. В многодоменном случае спектр низкоэнергетических состояний размывается и приобретает щель. Также изучена модификация поверхностных состояний под влиянием сложных текстур намагниченности типа блоховской и неелевской доменной стенки. Исследованы электронные состояния, индуцированные неколлинеарными текстурами намагниченности в АФМ ТИ. Такие текстуры реализуются на поверхности (0001) образцов  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ , помещённых во внешнее поле. Проведена классификация состояний на топологические и тривиальные и описана эволюция их спектров с изменением взаимной ориентации намагниченностей в доменах. Обозначены условия для возникновения «тяжелого» фермиона на поверхности АФМ ТИ с одноосной анизотропией. Предложены способы экспериментального обнаружения одномерного состояния, связанного с доменной стенкой, и обсуждён возможный вклад этого состояния в новые квантовые эффекты на поверхности АФМ ТИ типа  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ .

Исследование топологии электронных спектров тонких плёнок  $\text{MnSb}_2\text{Te}_4$  толщиной от одного до восьми семислойных структурных блоков показало, что в пределе тонкой пленки не только магнитная фаза, но также электронный спектр и топологические свойства сильно зависят от толщины. Спектр пленки толщиной в один блок демонстрирует непрямую щель, значительно большую, чем в плёнке родственного соединения  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ . Расчеты числа Черна показывают, что такая плёнка является топологически тривиальным ферромагнетиком. При увеличении толщины до 2, 3 и 4 блоков имеется межслойный антиферромагнетизм (компенсированный или некомпенсированный для четной и нечетной толщин) и ширина щели последовательно уменьшается с ростом толщины пленки, при этом число Черна для всех этих плёнок нулевое. Однако, в ферромагнитной фазе (что может быть достигнуто приложением внешнего магнитного поля), число Черна оказывается равным  $-1$  в случае пленки толщиной 4 блока. Это означает, что такая плёнка  $\text{MnSb}_2\text{Te}_4$  является изолятором Черна, который должен обеспечивать квантовый эффект Холла во внешнем магнитном поле без уровней Ландау, как недавно подтвердилось для пленки родственного соединения  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ . Обращение намагниченности данной пленки  $\text{MnSb}_2\text{Te}_4$  дает изолятор Черна характеризующийся  $C = +1$ , тем самым доказывая так называемое квантовое состояние Холла с нулевым плато проводимости в скомпенсированном антиферромагнитном состоянии этой пленки, что является характеристикой фазы аксионного изолятора (AXI). При толщине плёнки в пять блоков топологическая фаза снова оказывается тривиальной. Как и в случае с пленкой толщиной 4 блока, мы также прогнозируем собственные состояния аксионного изолятора для пленок толщиной 6 и 8 блоков. Достаточно толстая пленка, толщиной семь блоков  $\text{MnSb}_2\text{Te}_4$ , находится в фазе квантового аномального изолятора Холла (QANI), но при этом запрещённая щель очень мала,  $\sim 5$  мэВ. Таким образом, как и в пленках  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ , пленки  $\text{MnSb}_2\text{Te}_4$  также демонстрируют чередование топологических фаз AXI/QANI, однако из-за более слабого спин-орбитального взаимодействия в  $\text{MnSb}_2\text{Te}_4$ , они появляются при больших толщинах чем в пленках  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ . Рассмотрение сэндвичных структур типа  $\text{MnSb}_2\text{Te}_4/(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_n/\text{MnSb}_2\text{Te}_4$  с разным количеством структурных блоков

$\text{Sb}_2\text{Te}_3$ , от 1 до 3, которые являются тонкими пленками соединений  $(\text{MnSb}_2\text{Te}_4)(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_n$  с окончанием магнитным блоком, показало что для  $n = 1$  и 2 такие пленки имеют топологически тривиальную фазу как для параллельного, так и для антипараллельного намагниченностей в магнитных блоках, тогда как пленка с  $n = 3$  оказывается в фазах AFM AXI и изолятора Черна для AFM и FM состояний, соответственно. Аналогичное поведение также ожидается для  $n = 4$  и 5.

Изучение электронной структуры двумерных магнитных тонких плёнок вида  $(\text{Bi}_2\text{Se}_3)_m(\text{MnBi}_2\text{Se}_3)(\text{Bi}_2\text{Se}_3)_n(\text{MnBi}_2\text{Se}_3)(\text{Bi}_2\text{Se}_3)_m$ , где магнитные блоки слоистого антиферромагнетика  $\text{MnBi}_2\text{Se}_4$  разделены  $n$  блоками топологического изолятора  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ , а также  $m$  блоков  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  могут находиться на поверхности ( $n$  и  $m$  могут принимать в том числе и нулевые значения) при антипараллельной и параллельной намагниченности в слоях  $\text{MnBi}_2\text{Se}_4$  показало, что тонкопленочные гетероструктуры, в которых магнитные блоки размещены на поверхности или вблизи поверхности с прослойкой топологического изолятора не менее 3 блоков, являются потенциальными кандидатами для реализации топологических краевых состояний в относительно большой запрещенной зоне. В то же время гетероструктуры, в которых число слоев  $n$  является небольшим или такая прослойка отсутствует, а также гетероструктуры в которых магнитные блоки расположенные глубоко под поверхность, характеризуются небольшой (или даже отсутствующей) гибридационной щелью и являются топологически тривиальными. При этом в гетероструктурах с  $m = 1$  и  $n = 3$  и более возможно переключение из тривиальной в топологическую фазу за счет приложения внешнего магнитного поля, что подтверждается возникновением спин-поляризованного одномерного состояния в рассчитанном одномерном спектре края пленки при включении поля и его отсутствии в случае антипараллельной намагниченности магнитных блоков.

Проведены расчеты поверхностной электронной структуры топологических изоляторов с поверхностным блоком допированным кобальтом в позициях замещения  $\text{Bi}(\text{Sb})$  в бинарных топологических изоляторах  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ ,  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  и  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  и исследовано влияние концентрации магнитного допанта на величину магнитной щели в дираковском состоянии. При концентрации кобальта, когда каждый восьмой атом пниктогена в поверхностном блоке замещен атомом  $\text{Co}$ , было обнаружено что магнитные моменты  $\text{Co}$  имеют предпочтительную ориентацию спина перпендикулярно плоскости поверхности. Такая спиновая конфигурация атомов кобальта, наряду с локализацией дираковского состояния в основном во внешнем блоке и около первого ван-дер-ваальсова промежутка, где оно перекрывается с орбиталями  $\text{Co}$ , обеспечивает наличие щели в поверхностном спектре топологических изоляторов, которая равная 14 и 12 мэВ для  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  и  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  соответственно, а для  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  она заметно больше, 43.5 мэВ. Однако уменьшение концентрации  $\text{Co}$  в  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  путем создания больших сверхячеек приводит к почти линейному уменьшению щели. В целом ширина щели в бинарных топологических изоляторах хорошо согласуется с экспериментальной щелью в соединении  $\text{BiSbTeSe}_2$ , поверхностно допированном кобальтом.

Исследование электронных свойств гетероструктуры, состоящей из подложки  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  и тонкого поверхностного слоя  $\text{BiTeI}$  выявило зависимость спектра от типа контакта между ними ( $\text{Te-Te}$  или  $\text{I-Te}$ ). В случае контакта  $\text{Te-Te}$  наблюдается слабое изменение электростатического потенциала в области вблизи границы с вакуумом по сравнению со случаем чистой поверхности  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ . Данный вариант контакта может рассматриваться как естественное продолжение поверхности соединения  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ . При этом наличие пленки  $\text{BiTeI}$  приводит к модификации топологического поверхностного состояния, заключающейся в смещении локализации топологического состояния в область трёхслойного блока и, таким образом, в уменьшении его обменного расщепления. При увеличении расстояния между плёнкой и подложкой, а также при уменьшении вклада спин-орбитального взаимодействия происходит увеличение обменной запрещённой щели. В случае контакта  $\text{I-Te}$  возникает значительное изменение градиента потенциала вблизи границы с вакуумом. В случае данного контакта наблюдается индуцирование гибридного четырёхзонного состояния являющегося комбинацией конуса Дирака и состояния Рашбы. При этом взаимодействие между подложкой и плёнкой приводит к возникновению гибридной щели. Наличие магнитного момента на подложке приводит к возникновению обменного расщепления двух крамеровских вырождений в четырёхзонном состоянии. Это индуцирует транспортный отклик за счёт конечного значения некантованной холловской проводимости в отсутствие внешнего магнитного поля, что является признаком исследуемого четырёхзонного состояния в транспортных экспериментах.

Проведенные расчёты электронной структуры тонких пленок соединений  $\text{Bi}_2\text{TeI}$  и  $\text{Bi}_2\text{TeBr}$  показали, что в отличие от соответствующих объёмных фаз и от бислоя  $\text{Bi}(111)$ , характеризующихся ненулевым топологическим индексом, пленки  $\text{Bi}_2\text{TeI}$  и  $\text{Bi}_2\text{TeBr}$  являются топологически тривиальными. В ассиметричной гетероструктуре, где с одной стороны от бислоя висмута расположены слои  $-\text{I-Bi-Te}$ , а с другой  $-\text{Br-Bi-Te}$ , в силу исчезновения инверсионной симметрии происходит снятие спинового вырождения зон и за счёт их расщепления спектр становится полуметаллическим, с практически нулевой плотностью состояний на уровне Ферми. С помощью небольших вариаций химпотенциала возможно переключение на спин-поляризованные состояния валентной зоны или зоны проводимости, которые формируют два Ферми контура. Спиновая текстура состояний проводимости в целом подобна текстуре рашбовских состояний, тогда как спиновая текстура валентных зон является более анизотропной.

Показано, что осаждение монослойной пленки  $\text{Pb}$  приводит к смещению объёмного континуума электронных состояний  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  вниз по сравнению с чистым  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ . Вместе с тем точка Дирака смещается в сторону большей энергии в объёмной запрещённой зоне, и такое смещение более значимо в случае двух монослоев  $\text{Pb}$ . Обнаружена осциляция значений работы выхода в зависимости от толщины пленки  $\text{Pb}$ , которая типична для свободных пленок  $\text{Pb}$ . Показано, что электронная структура поверхности сильно зависит от количества монослоев  $\text{Pb}$ .