

# МОДУЛЯЦИЯ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ В ТОЧКЕ ДИРАКА В АНТИФЕРРОМАГНИТНОМ ТОПОЛОГИЧЕСКОМ ИЗОЛЯТОРЕ $MnBi_2Te_4$ КАК РЕЗУЛЬТАТ ИЗМЕНЕНИЙ ПОВЕРХНОСТНОГО ГРАДИЕНТА ПОТЕНЦИАЛА

А. М. Шижин <sup>a\*</sup>, Д. А. Естюнин <sup>a</sup>, Н. Л. Зайцев <sup>b</sup>, Д. А. Глазкова <sup>a\*\*</sup>,  
И. И. Климовских <sup>a</sup>, С. О. Фильнов <sup>a</sup>, А. Г. Рыбкин <sup>a</sup>, К. А. Кох <sup>c,a</sup>,  
О. Е. Терещенко <sup>d,e,a</sup>, К. А. Звездин <sup>f,g</sup>, А. К. Звездин <sup>f,g</sup>

<sup>a</sup> Санкт-Петербургский государственный университет, 198504, Санкт-Петербург, Россия

<sup>b</sup> Институт физики молекул и кристаллов Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук  
450075, Уфа, Россия

<sup>c</sup> Институт геологии и минералогии им. В. С. Соболева Сибирского отделения Российской академии наук  
630090, Новосибирск, Россия

<sup>d</sup> Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук  
630090, Новосибирск, Россия

<sup>e</sup> Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, Россия

<sup>f</sup> Институт общей физики им. А. М. Прохорова Российской академии наук, 119991, Москва, Россия

<sup>g</sup> Российский квантовый центр, 143025, Сколково, Россия

Поступила в редакцию 29 июля 2021 г.,  
после переработки 14 августа 2021 г.  
Принята к публикации 19 августа 2021 г.

Методами фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением показана возможность существенно-го различия величин энергетической запрещенной зоны в точке Дирака в диапазоне от 15 до 55 мэВ для различных образцов антиферромагнитного топологического изолятора  $MnBi_2Te_4$ . Методом теории функционала плотности проведен анализ взаимосвязи величины запрещенной зоны в точке Дирака со значением градиента поверхностного потенциала, изменение которого моделировалось приложением внешнего электрического поля перпендикулярно поверхности (0001)  $MnBi_2Te_4$ . Показана возможность как уменьшения, так и увеличения размеров запрещенной зоны в диапазоне от 5 до 89 мэВ при приложении поля относительно исходного значения 81 мэВ. При приложении поля наблюдалось изменение локализации топологических поверхностных состояний и магнитных моментов поверхностных атомов. Проведенный анализ показывает возможность искусственной модуляции величины запрещенной зоны в точке Дирака в широком энергетическом диапазоне, что может быть использовано для модуляции магнитоэлектрических свойств систем на основе  $MnBi_2Te_4$  в прикладных исследованиях и задачах.

DOI: 10.31857/S0044451022010114

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Поиск и изучение эффектов и систем с уникальным сочетанием топологических и магнитных

свойств, а также основных факторов, ответственных за свойства таких систем является одной из наиболее важных и актуальных научных проблем современной физики конденсированных сред. Одними из наиболее ярких представителей подобных эффектов являются квантовый аномальный эффект Холла (КАЭХ) и топологический квантовый магнитоэлектрический (МЭ) эффект, которые основаны на кван-

\* E-mail: ashikin@inbox.ru

\*\* E-mail: daria.a.glazkova@gmail.com

товании холловской проводимости и МЭ-отклика соответственно (см., например, статьи [1–5]). Интенсивное изучение данных эффектов началось с открытия топологических изоляторов (ТИ), легированных атомами магнитных металлов [1–17].

Комбинация симметрии обращения времени и большого спин-орбитального взаимодействия в ТИ приводит к изменению топологии системы и появлению защищенных топологических поверхностных состояний (ТПС) с дисперсионной зависимостью в виде конуса Дирака. Для данных состояний характерна геликоидальная спиновая структура, т.е. состояния оказываются поляризованными по спину, за исключением вершины конуса — точки Дирака. При этом влияние магнитных примесей с ориентацией магнитного момента перпендикулярно поверхности приводит к нарушению симметрии обращения времени, снятию вырождения по спину и открытию энергетической запрещенной зоны в точке Дирака. В результате в данных системах может наблюдаться формирование взаимосвязи между приложенным и наведенным магнитным и электрическим полями путем МЭ-отклика (с универсальным коэффициентом, зависящим от постоянной тонкой структуры), который определяет реализацию отмеченных выше квантовых топологических эффектов [1–10].

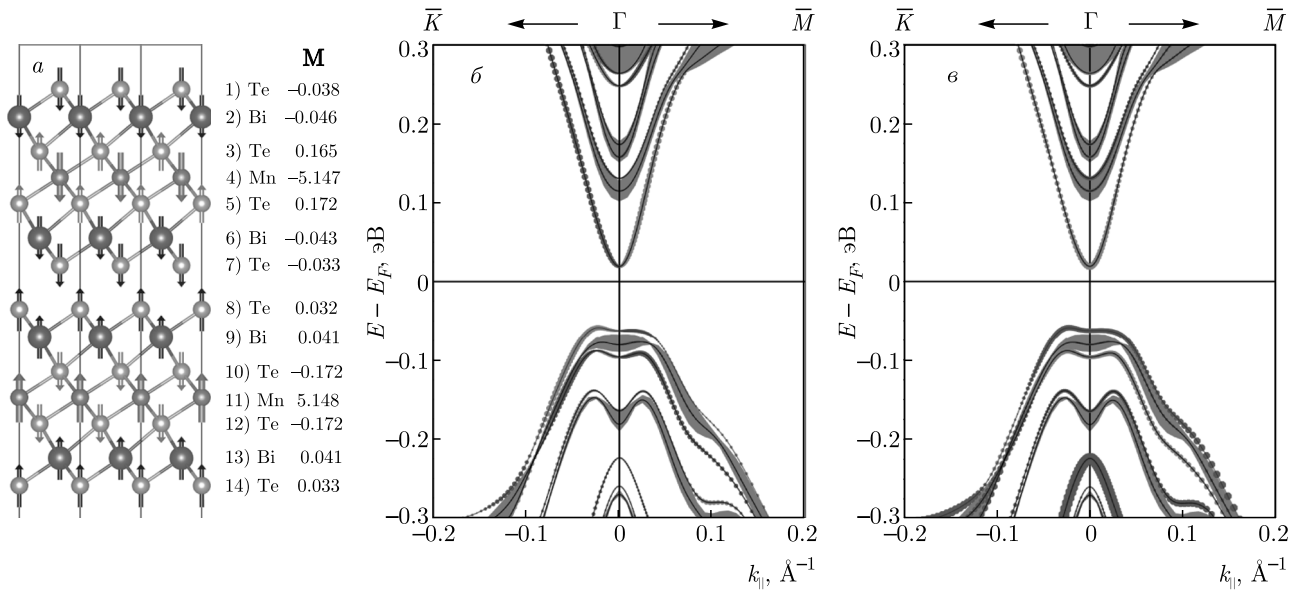
В настоящее время магнитные ТИ являются наиболее интенсивно используемой платформой для изучения КАЭХ [5]. При этом, если КАЭХ в магнитных ТИ уже довольно хорошо исследован [1, 2, 5, 6, 11–14], то МЭ-эффект и условия его реализации (МЭ-отклик) до сих пор практически не изучены. Поэтому изучение и анализ МЭ-отклика в магнитных ТИ является важной научной задачей.

Как было сказано выше, наличие эффективно магнитного поля в ТИ с ориентацией перпендикулярно поверхности приводит к открытию запрещенной зоны в структуре ТПС в точке Дирака. Изменение магнитного поля соответственно будет приводить к изменению запрещенной зоны. Так, для магнитно-легированных ТИ увеличение концентрации атомов магнитной примеси приводит к росту эффективного магнитного поля в области локализации ТПС, что сопровождается увеличением размеров запрещенной зоны [4, 15, 16, 18, 19]. Однако большим недостатком данных магнитных ТИ является неоднородность распределения магнитных примесей, что приводит к значительной вариации величины запрещенной зоны по поверхности образца. Этот недостаток отсутствует в недавно представленном магнитном ТИ нового типа: собственный магнитно-упорядоченный антиферромаг-

нитный (АФМ) ТИ со стехиометрией  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  [20–28]. Структура данного материала характеризуется однородным и упорядоченным расположением атомов магнитного металла (Mn), что способствует открытию большой запрещенной зоны в точке Дирака: до 85–88 мэВ согласно теоретическим расчетам и 60–70 мэВ согласно экспериментальным исследованиям [20, 22, 24, 29, 30].

Структура АФМ ТИ  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  вдоль направления (0001) формируется из семислойных блоков, разделенных ван-дер-ваальсовыми промежутками. Каждый блок состоит из последовательности атомных слоев (Te–Bi–Te–Mn–Te–Bi–Te) (см. рис. 1). Внутри каждого семислойного блока атомы Mn связаны ферромагнитно (ФМ). При этом взаимодействие между соседними семислойными блоками и соответствующими магнитными марганцевыми слоями имеет АФМ-характер [20, 21]. Упорядоченная структура магнитных атомов в данном материале также приводит к высокой температуре Нееля  $T_N = 24.5$  К (температуре объемного перехода из АФМ-состояния в парамагнитное). Таким образом, наличие большой запрещенной зоны в точке Дирака предполагает возможность более детального анализа магнитных и электрических взаимодействий, формирующихся в магнитных ТИ, и того, как данные взаимодействия могут проявляться в модуляции величины запрещенной зоны, открываемой в точке Дирака. Комбинация большой запрещенной зоны с высокой  $T_N$  (в сравнении с магнитно-легированными ТИ) позволяет наблюдать переход в состоянии КАЭХ при более высокой температуре. Недавно была показана возможность реализации КАЭХ в тонких слоях  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  при температуре вплоть до 6.5 К [7].

Однако в последних работах было показано, что величина запрещенной зоны в точке Дирака для  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  может существенно отличаться от теоретически предсказанной. В ряде работ была показана возможность «бесщелевой» дисперсии ТПС, измеренной для  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ФЭСУР) [26–28]. Отсутствие запрещенной зоны в дисперсионных зависимостях ТПС связывалось с модификацией магнитного порядка в верхнем слое. Также в работе [30] было показано, что величина запрещенной зоны в точке Дирака может быть изменена за счет поверхностной релаксации ван-дер-ваальсовых расстояний между первым и вторым семислойными блоками, сопровождающейся изменением локализации ТПС (при сохранении общего магнитного порядка в верхнем слое [30]). Это, в свою очередь,



**Рис. 1.** (В цвете онлайн) *a*) Схематическое изображение расположения атомов Mn (синий), Bi (фиолетовый) и Te (цвета хаки) в расчетной ячейке для поверхности (0001) АФМ ТИ  $MnBi_2Te_4$  (границы ячейки показаны сплошной линией). Вдоль оси  $z$ , начинающейся с верхней границы ячейки, показаны первые два поверхностных семислойных блока. Здесь же указаны направления и величины магнитных моментов атомов  $M$ . *б*) и *в*) Спин-разрешенная зонная структура для состояний со спиновой ориентацией соответственно вдоль (in-plane) и перпендикулярно (out-of-plane) поверхности. Синие и красные линии отвечают противоположным направлениям спина, размер кружков соответствует проекции спина на состояние верхнего блока. Серым цветом обозначены проекции объемных состояний

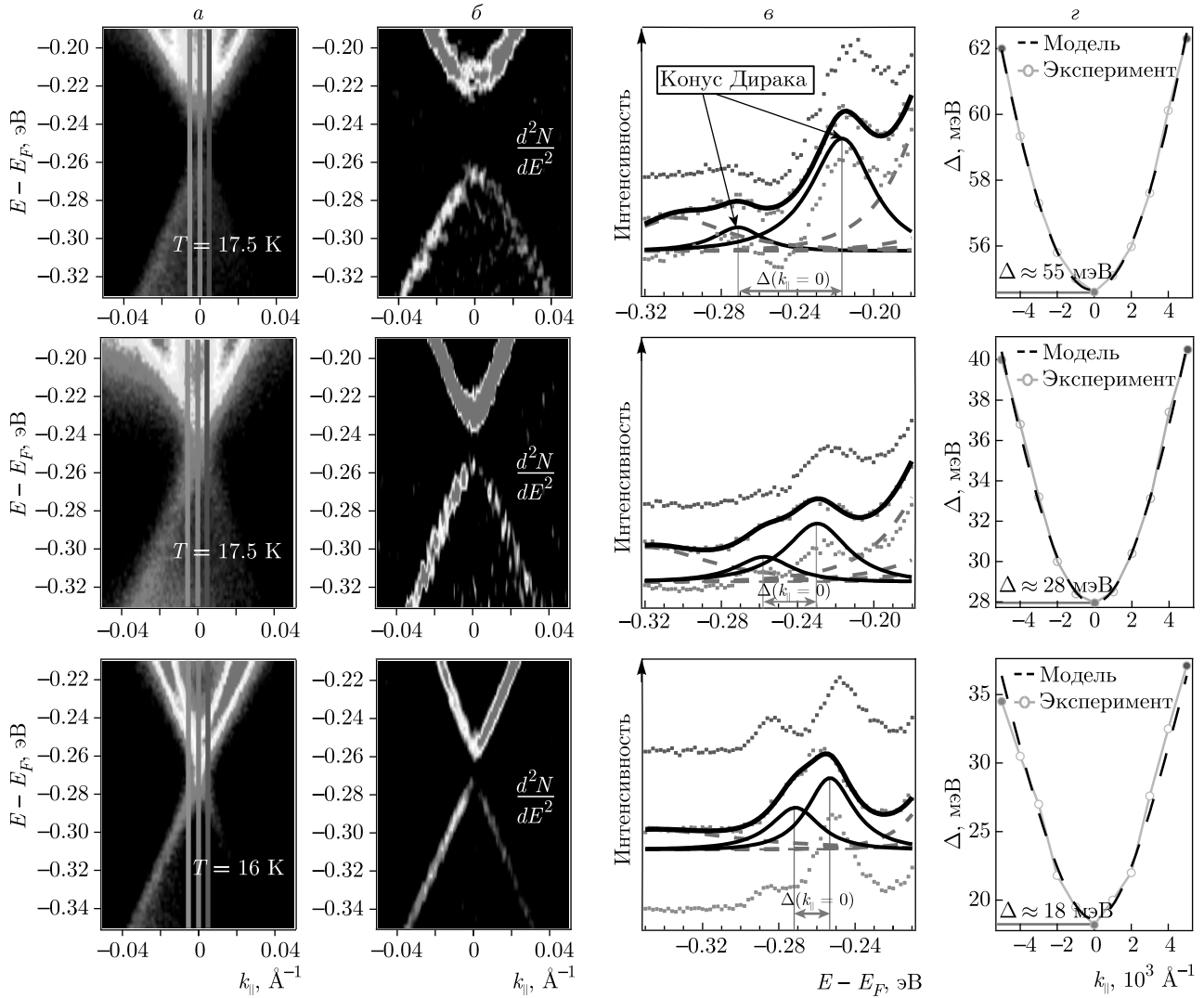
ведет к изменению эффективного магнитного поля, действующего на ТПС, и соответствующей модуляции величины запрещенной зоны в точке Дирака. Таким образом, изменение запрещенной зоны в достаточно широком диапазоне в магнитных ТИ, в частности в  $MnBi_2Te_4$ , может быть связано с рядом дополнительных эффектов, которые не обязательно определяются магнитным взаимодействием.

В настоящей работе представлены и проанализированы экспериментальные изменения в величине запрещенной зоны в точке Дирака, полученные методом ФЭСУР для различных образцов АФМ ТИ  $MnBi_2Te_4$ . Предложены основные факторы, которые могут обуславливать подобные изменения величины запрещенной зоны. Для выявления данных факторов будут использованы расчеты зонных структур  $MnBi_2Te_4$  методом теории функционала плотности при приложении электрического поля перпендикулярно поверхности, которое моделирует изменение поверхностного градиента потенциала, или при изменении спин-орбитального (СО) взаимодействия для поверхностных атомов Te и Bi. На основе данных расчетов будут представлены теоретические оценки влияния различного градиента поверхностного потенциала на величину запрещен-

ной зоны в точке Дирака, на перераспределение в локализации ТПС и изменение магнитных моментов на поверхностных атомах. Также будет показана корреляция между изменениями запрещенной зоны в точке Дирака при изменении СО-взаимодействия, а также градиента поверхностного потенциала.

## 2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

На рис. 2 показаны дисперсионные зависимости ТПС, измеренные методом ФЭСУР для различных образцов  $MnBi_2Te_4$  в области запрещенной зоны, открываемой в точке Дирака. Представлены дисперсионные зависимости ТПС для случаев трех различных величин запрещенной зоны для различных образцов  $MnBi_2Te_4$ . Спектры были измерены с использованием лазерного излучения с энергией фотонов 6.3 эВ для фотовозбуждения при температурах ниже  $T_N$ , т.е. когда измеряемые системы характеризуются магнитным упорядочением. В левой колонке (рис. 2*a*) представлены ФЭСУР-спектры, показывающие изменения интенсивности измеряемого фотосигнала для разных значений волнового вектора  $k_{||}$ . Данные спектры демонстрируют пове-



**Рис. 2.** (В цвете онлайн) *a, б*) Дисперсионные зависимости топологических поверхностных состояний (ТПС) в форме соответственно  $N(E)$  и  $d^2N/dE^2$ , измеренные для разных образцов  $MnBi_2Te_4$  и характеризующиеся различной величиной запрещенной зоны, открываемой в точке Дирака. *в*) Соответствующие профили электронных состояний (ПЭС), представленные в области точки Дирака (при  $k_{||} = 0$ ), с разложением на спектральные составляющие (черные сплошные пики — состояния конуса Дирака, серые штриховые пики — состояния валентной зоны и зоны проводимости). Сплошная черная кривая — сумма всех компонент разложения, синие и зеленые символы — ПЭС, измеренные при положительных и отрицательных  $k_{||}$  (см. вертикальные линии соответствующего цвета на рис. 2*a*). *г*) Изменения величины энергетического расщепления  $\Delta$  между состояниями верхней и нижней частей дираковского конуса как функция от  $k_{||}$

дение дисперсионных зависимостей ТПС вдоль направления, проходящего через  $\Gamma$ -точку. На рис. 2*б* данные дисперсионные зависимости представлены в форме второй производной интенсивности по энергии ( $d^2N/dE^2$ ) для лучшей визуализации изменений размеров запрещенной зоны. На рис. 2*в* красными символами показаны соответствующие распределения плотности электронных состояний (ПЭС), измеренные непосредственно в  $\Gamma$ -точке. Здесь же для

сравнения представлены ПЭС, измеренные по обе стороны от  $\Gamma$ -точки (при положительном и отрицательном значениях  $k_{||}$ ), которые показаны синими и зелеными символами (на рис. 2*a* данные значения  $k_{||}$  отмечены вертикальным линиям соответствующего цвета). На рис. 2*г* представлено разложение измеренных ПЭС на спектральные составляющие (компоненты), черной кривой отмечена сумма всех пиков разложения. Энергетические положения пиков,

отмеченных черными линиями, соответствуют краям запрещенной зоны, открываемой в точке Дирака, и показывают ее величину  $\Delta(k_{\parallel} = 0)$  для различных образцов. Рисунок 2г показывает зависимость энергетического расщепления  $\Delta(k_{\parallel})$  между состояниями верхнего и нижнего конусов ТПС (полученного из аналогичных разложений на спектральные составляющие) при изменении величины и знака  $k_{\parallel}$  относительно  $\Gamma$ -точки. Точки соответствуют экспериментальным значениям, полученным из разложений экспериментальных ПЭС. Экспериментальные точки аппроксимируются модельной кривой вида

$$E(k) \sim \sqrt{\alpha^2 k^2 + \Delta^2},$$

где  $\Delta$  соответствует размеру запрещенной зоны в точке Дирака, величина  $\alpha$  пропорциональна  $h\nu_F$ . Такой подход позволяет уменьшить ошибку при оценке величины запрещенной зоны в точке Дирака (с погрешностью около 5 мэВ). Минимальное энергетическое расщепление соответствует величине запрещенной зоны в точке Дирака.

В ходе измерений по серии образцов было выявлено, что разные образцы характеризуются различными значениями запрещенной зоны в точке Дирака, величины которых концентрировались в энергетических диапазонах 50–55 мэВ, 28–33 мэВ и 15–20 мэВ. Каждая из дисперсионных зависимостей, представленных на рис. 2, попадает в один из трех энергетических диапазонов, формируемых запрещенной зоной.

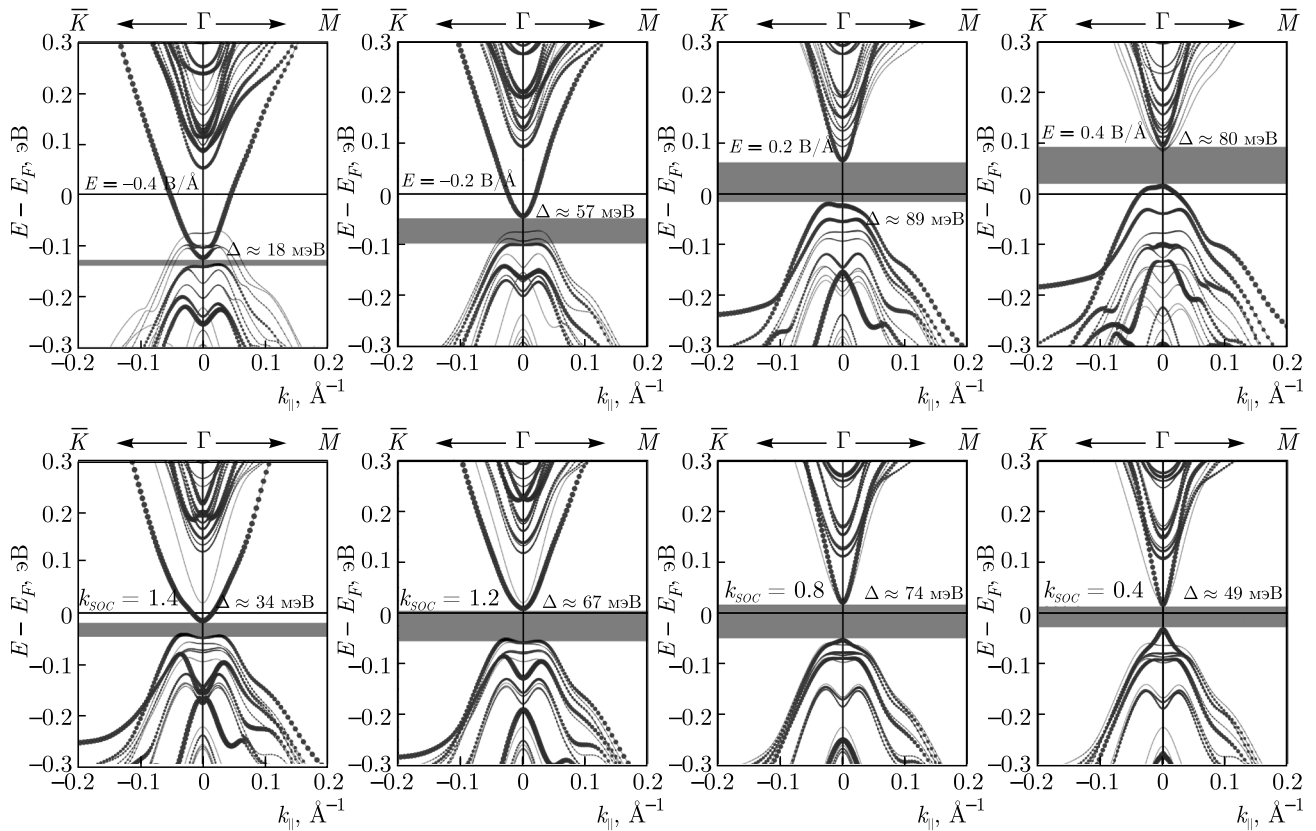
### 3. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОЦЕНКИ И ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Ниже, используя расчеты в рамках теории функционала плотности, проанализируем влияние варьируемого внешнего электрического поля, приложенного перпендикулярно поверхности АФМ ТИ  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ , на модуляцию величины запрещенной зоны, открываемой в точке Дирака. Приложением электрического поля возможно изменять градиент поверхностного потенциала, который будем рассматривать в качестве обобщенного параметра, связанного с влиянием различного типа заряженных поверхностных дефектов. При этом будет сделана попытка проанализировать факторы, определяющие поверхностный МЭ-отклик системы, при вариации знака и напряженности приложенного внешнего электрического поля. Кроме того, будет рассмотрено влияние изменения СО-взаимодействия приповерхностных атомов на структуру ТПС и запрещенной зоны в точке Дирака.

Следует отметить, что в семислойном блоке  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  можно выделить две подсистемы, обладающие определенным магнитным порядком и нечетные относительно обращения времени. Первой является система  $d$ -ионов Mn, заполняющих центральный слой в семислойном блоке  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ . Магнитные моменты ионов Mn описываются достаточно локализованными волновыми функциями  $d$ -оболочек и характеризуются сильным обменным ФМ-взаимодействием внутри Mn-слоя и значительно более слабым АФМ-взаимодействием между слоями в соседних семислойных блоках. Вторая подсистема — это система атомов Bi, Te, которая становится магнитной при взаимодействии с соседними  $d$ -ионами Mn в структуре  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ , а также характеризуется наличием значительной плотности топологических состояний (для поверхностных семислойных блоков). Таким образом, именно намагниченность второй подсистемы, несмотря на меньший магнитный момент (см. рис. 1а) в сравнении с первой, обуславливает формирование и величину запрещенной зоны в точке Дирака для ТПС. Поэтому можно ожидать, что именно изменения магнитных моментов поверхностных атомов второй подсистемы (Bi, Te) будет оказывать заметное влияние на модификацию запрещенной зоны. Структура расположения атомов Mn, Bi и Te в первых двух поверхностных семислойных блоках с представлением величин и направлений магнитных моментов на данных атомах показаны схематично на рис. 1а.

Расчеты в рамках теории функционала плотности, проведенные в данной работе для идеального кристалла  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ , показывают величину запрещенной зоны, открываемой в точке Дирака, равную 81 мэВ (при нулевом приложенном внешнем электрическом поле). Данная оценка согласуется с результатами оценки величины запрещенной зоны для АФМ ТИ  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  в работе [20]. Рассчитанные спин-зависимые дисперсионные зависимости ТПС в области точки Дирака для состояний со спиновой проекцией вдоль (in-plane) и перпендикулярно (out-of-plane) поверхности представлены соответственно на рис. 1б и 1в. Данные зависимости имеют ярко выраженную геликоидальную спиновую структуру вдоль поверхности и спиновую структуру, подобную «ежу» (hedgehog spin structure), перпендикулярно поверхности, что является характерным для магнитных ТИ [15].

Известно, что на поверхности кристалла вследствие обрыва периодической решетки возникает поверхностный потенциал  $\Phi_S$  и соответствующее ему электрическое поле  $E_S(r_S)$ , проникающее в глубь

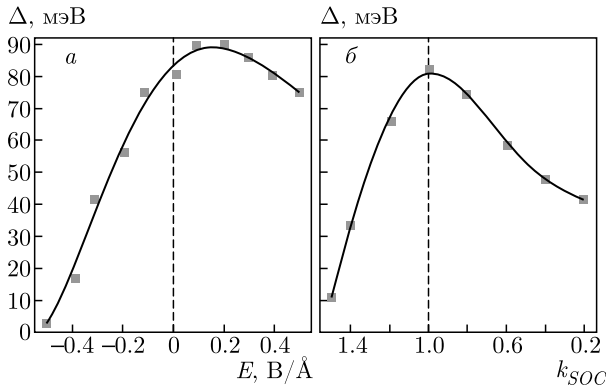


**Рис. 3.** (В цвете онлайн) Рассчитанная зонная структура поверхности (0001)  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  при приложении внешнего электрического поля перпендикулярно поверхности напряженностью  $-0.4$ ,  $-0.2$ ,  $0.2$  и  $0.4$  В/Å (верхний ряд рисунков), а также для различных величин СО-взаимодействия поверхностных атомов Te и Bi (нижний ряд). Исходная величина взаимодействия соответствует 1. Запрещенная зона  $\Delta$  в точке Дирака ТПС отмечена серыми прямоугольниками. Размер синих кружков показывает величину проекции на состояния первого блока. Приведены значения напряженности приложенного электрического поля, результирующие величины  $\Delta$  и коэффициенты СО-взаимодействия  $k_{\text{SOC}}$

кристалла. При этом величина градиента возникшего поверхностного потенциала может зависеть от локальной работы выхода системы, определяемой, в том числе, дефектностью поверхности и приповерхностной областью, а также локальным поверхностным зарядом. В связи с этим величина градиента поверхностного потенциала может оказаться различной для разных экспериментально измеряемых образцов или областей одного и того же образца. В свою очередь, изменения градиента поверхностного потенциала будут влиять на электронную структуру кристалла вблизи поверхности. При этом можно предположить, что это изменение будет оказывать влияние на запрещенную зону в точке Дирака и приводить к тому, что ее величина будет существенно различаться для различных образцов  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ .

Для того чтобы проверить возможность данного предположения в работе были проведены расчеты

влияния приложенного электрического поля (и соответствующего градиента поверхностного потенциала) на электронную структуру ТПС для  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  и соответствующее изменение величины запрещенной зоны в точке Дирака. На рис. 3 (верхний ряд) представлены результаты расчетов электронной структуры  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  для различных напряженностей электрического поля, приложенного вдоль и противоположно нормали к поверхности в пределах от  $-0.5$  В/Å до  $+0.5$  В/Å. Представленные дисперсионные зависимости ТПС демонстрируют изменения величины запрещенной зоны в точке Дирака при вариации напряженности и знака приложенного электрического поля. Соответствующие изменения в виде графика  $\Delta(E)$  представлены на рис. 4а. При приложении электрического поля «отрицательной» направленности (соответствующей увеличению отрицательного заряда на поверхности) величина за-



**Рис. 4.** а) Рассчитанное изменение величины запрещенной зоны, открываемой в точке Дирака, в зависимости от величины и знака приложенного электрического поля (а) и при изменении величины СО-взаимодействия (б) для поверхностных атомов Te1 и Bi2. Аппроксимирующие кривые представлены для лучшей визуализации

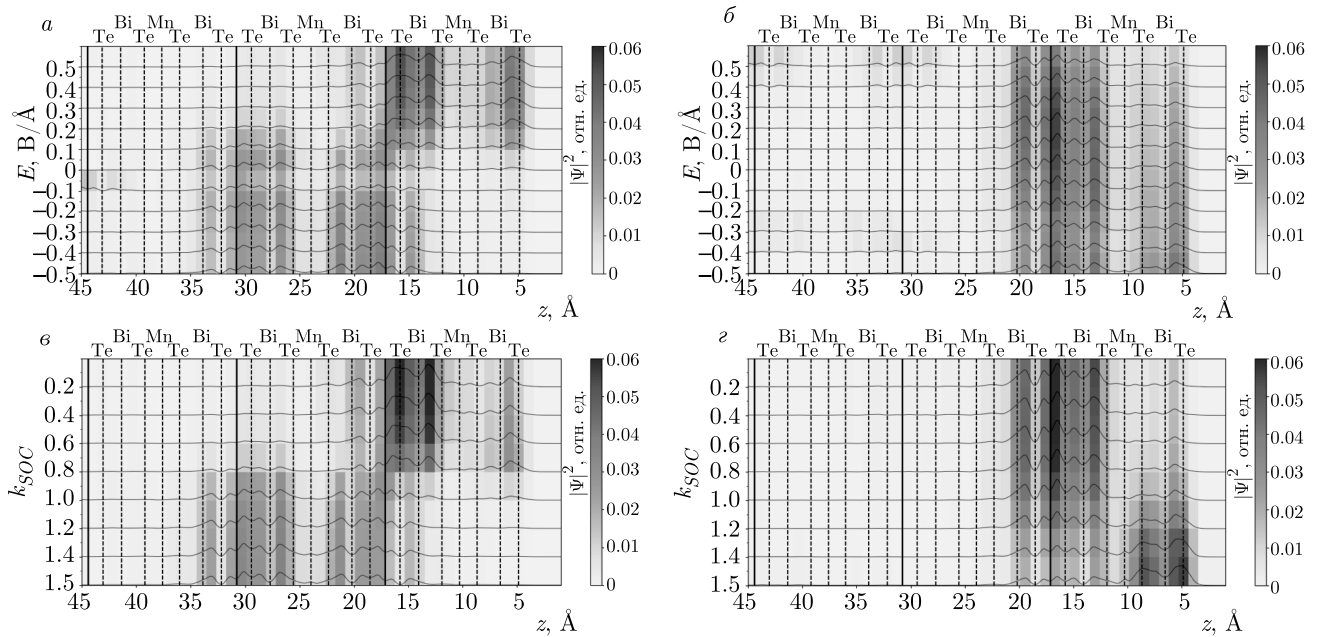
прещенной зоны может уменьшаться практически до нуля при напряженности электрического поля  $-0.5 \text{ В/Å}$ . Для «положительного» направления приложенного электрического поля (соответствует увеличению положительного заряда на поверхности) величина запрещенной зоны сначала растет от 81 до 89 мэВ, а затем начинает уменьшаться, хотя гораздо медленнее (рис. 4а). Аналогичные изменения величины запрещенной зоны показывают расчеты ее зависимости от величины поверхностного заряда [31], определяемого концентрацией заряженных дефектов в приповерхностной области, что также может соответствовать вариации результирующего поверхностного градиента потенциала.

При этом важно понять, какими факторами могут быть обусловлены представленные изменения величины запрещенной зоны в точке Дирака. С одной стороны, вследствие АФМ-характера магнитной связи между первым и вторым семислойными блоками можно предположить, что отмеченные выше изменения величины запрещенной зоны в точке Дирака могут быть обусловлены изменением локализации ТПС при приложении электрического поля. Действительно, если плотность ТПС распределена равномерно в первом и втором семислойных блоках, то эффективное магнитное поле, действующее на ТПС, по причине АФМ-характера магнитной связи между блоками будет взаимно компенсироваться [30]. Для проверки данного предположения были проведены расчеты перераспределения локализации верхней и нижней частей дираковского конуса в зависимости от приложенного электрического поля.

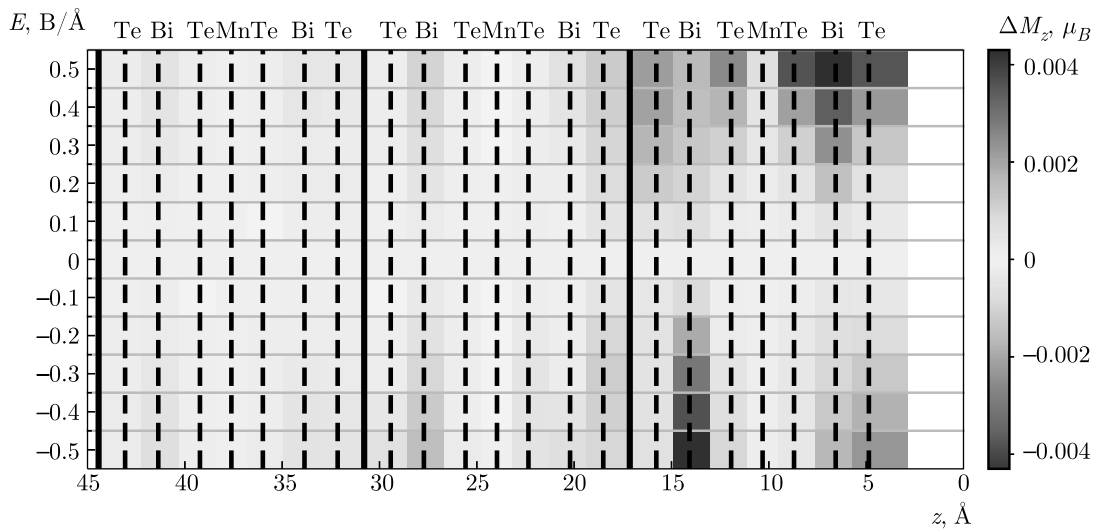
Из анализа величин, представленных на рис. 5а,б, видно, что состояния верхней части дираковского конуса локализованы в основном в поверхностном семислойном блоке, тогда как локализация состояний нижней части конуса распространяется значительно глубже, в область второго, нижележащего блока. Это может быть связано с их частичной гибридизацией с состояниями валентной зоны, что может быть подтверждено некоторым искажением дисперсионных зависимостей для состояний нижней части дираковского конуса по сравнению с идеальным конусом (см. рис. 3). Внешнее электрическое поле существенно влияет на перераспределение локализации ТПС между первым и вторым блоками, причем по-разному для состояний верхней и нижней частей дираковского конуса ТПС.

Как видно на рис. 5а,б, при приложении электрического поля «отрицательной» направленности локализация ТПС нижней части дираковского конуса сдвигается в сторону второго семислойного блока с противоположным направлением магнитных моментов относительно поверхностного блока. Как было сказано, это может приводить к уменьшению эффективного поля, действующего на ТПС, и, как следствие, к уменьшению величины запрещенной зоны 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 в этом случае минимизируется, что и обуславливает максимальную величину запрещенной зоны в точке Дирака. Однако изменения локализации ТПС происходят существенно резче, чем изменения величины запрещенной зоны в точке Дирака.

Кроме перераспределения ТПС, приложенное электрическое поле приводит к изменению магнитных моментов поверхностных атомов, что может модулировать МЭ-отклик системы. На рис. 6 представлены соответствующие рассчитанные изменения величины магнитных моментов на атомах первых трех поверхностных семислойных блоков. Представленные результаты расчетов показывают явное изменение магнитных моментов в приповерхностных атомных слоях Bi и Te. При этом изменения магнитных моментов на каждом из атомов пропорциональны величине приложенного электрического поля, что является характерным для МЭ-отклика системы [1, 2]. Однако изменения магнитных моментов на противоположных концах поверхностного блока



**Рис. 5.** (В цвете онлайн) Изменение локализации квадрата волновой функции  $|\Psi|^2$  для нижней (а,в) и верхней (б,г) частей дираковского конуса в области первых трех семислойных блоков при изменении градиента поверхностного потенциала от  $-0.5 \text{ В/Å}$  до  $+0.5 \text{ В/Å}$  (а,б) и при изменении величины СО-взаимодействия (в,г) для поверхностных атомов Те и Би. Расстояния  $z$  вдоль нормали к поверхности (0001) начинаются от верхнего края ячейки и возрастают вглубь. Величина квадрата волновой функции показана цветом, диапазон изменения отмечен на цветовых шкалах



**Рис. 6.** (В цвете онлайн) Индуцированные изменения магнитных моментов на каждом из атомов в первых трех блоках относительно  $E = 0$  в зависимости от приложенного электрического поля. Изменения величин магнитных моментов показаны цветом в диапазоне, представленном на цветовой шкале

имеют противоположные знаки, что в сумме может приводить к частичному нивелированию эффекта от данного изменения магнитных моментов. Более того, абсолютные величины изменений магнитных

моментов также оказываются достаточно малыми по сравнению со значениями магнитных моментов на данных атомах, см. рис. 1а. Таким образом, данный эффект не может быть определяющим при из-



менении величины запрещенной зоны в точке Дирака, хотя и может модулировать МЭ-отклик системы.

С другой стороны, существенную роль в формировании зонной структуры ТИ (магнитных ТИ) играет СО-взаимодействие [32]. Его изменение может приводить к модификации структуры ТПС и, как следствие, к вариации величины запрещенной зоны в точке Дирака в случае магнитных ТИ. Можно также предположить, что существенное влияние будет оказывать изменение величины СО-взаимодействия в приповерхностном слое атомов (Te1 и Bi2 для  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ , см рис. 1а). В частности, подобное изменение может быть вызвано вариацией градиента поверхностного потенциала (подобно зависимости атомного СО-взаимодействия от величины атомного градиента потенциала) и/или наличием примесей (дефектов, вакансий) с меньшей величиной СО-взаимодействия в данных слоях [32].

Для проверки данного предположения были проведены расчеты электронных структур  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  при искусственном изменении величины СО-взаимодействия для поверхностных атомов Te1 и Bi2 в большую и меньшую стороны относительно исходного значения (СО-взаимодействие остальных атомов оставалось неизменным, внешнее поле не прикладывалось). Полученные расчетные дисперсионные зависимости представлены выше на рис. 3 (нижний ряд). Показана вводимая модуляция СО-взаимодействия относительно исходной величины, принятой за единицу. Эта величина имеет смысл коэффициента СО-взаимодействия  $k_{\text{SOC}}$  (spin-orbit coupling factor, SOC factor). Расчеты при обычном значении СО-взаимодействия для Te1 и Bi2 представлены, например, на рис. 1б,в. Как видно на рис. 3, запрещенная зона, отмеченная серыми прямоугольниками, может быть существенно изменена за счет вводимой модуляции СО-взаимодействия. Более наглядно изменения величины запрещенной зоны от величины СО-взаимодействия представлены на рис. 4б. Видно, что максимальное значение наблюдается при исходном  $(-1)$  значении СО-взаимодействия. При его увеличении или уменьшении наблюдается уменьшение запрещенной зоны, хотя оно имеет немного разную динамику изменения относительно исходного значения. Видна качественная корреляция с зависимостью запрещенной зоны от приложенного внешнего поля (или градиента потенциала) на рис. 4а. Также на основе расчетов были получены зависимости локализации состояний верхней и нижней частей конуса Дирака при изменении величины СО-взаимодействия — соответственно рис. 5б и 5г. Здесь также видна

корреляция с поведением данных состояний от приложенного поля.

Обнаруженные корреляции между зависимостями на рис. 4а и 4б, а также поведением локализации ТПС на рис. 5а,б и 5в,г показывают схожий характер влияния изменения градиента поверхностного потенциала и модуляции СО-взаимодействия поверхностных атомов на величину запрещенной зоны в точке Дирака. В свою очередь, это может свидетельствовать о причинно-следственной связи данных эффектов.

#### 4. ВЫВОДЫ

В рамках работы методом ФЭСУР экспериментально была показана возможность существования различных величин запрещенной зоны в точке Дирака для различных образцов АФМ ТИ  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ . Используя расчеты методом теории функционала плотности при различных приложенных электрических полях мы показали, что данные изменения в величинах запрещенной зоны могут быть связаны с изменениями локального градиента поверхностного потенциала для разных образцов. Проведенные расчеты показали возможность уменьшения величины запрещенной зоны в точке Дирака от 81 мэВ до 5 мэВ при приложении внешнего электрического поля напряженностью  $E = -0.5 \text{ В/Å}$ . Для электрического поля противоположной направленности величина запрещенной зоны первоначально увеличивается до 89 мэВ при  $E \approx 0.15 \text{ В/Å}$ , а затем начинает уменьшаться до 76 мэВ при  $E = 0.5 \text{ В/Å}$ . Кроме того, наблюдались изменения локализации ТПС и магнитных моментов поверхностных атомов при приложении поля, которые могут играть роль в изменении величины запрещенной зоны и модуляции магнитоэлектрического отклика. С другой стороны, при помощи расчетов было показано, что вариация СО-взаимодействия приповерхностных атомов Te1 и Bi2 также может приводить к подобным изменениям запрещенной зоны и локализации ТПС. Подобие результатов при вариации градиента поверхностного потенциала и СО-взаимодействия может говорить о взаимосвязи данных эффектов.

Проблема влияния приложенного электрического поля, изменения градиента поверхностного потенциала или СО-взаимодействия на величину запрещенной зоны в точке Дирака является сложной проблемой и требует дальнейшего более детального анализа. Однако при этом представленные результаты теоретически предсказывают возможность ис-

кусственной модуляции величины запрещенной зоны в точке Дирака приложенным электрическим полем, что может быть использовано для модуляции магнитно-электрических свойств систем на основе  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  в прикладных исследованиях и задачах.

## 5. МЕТОДЫ

Измерения дисперсионных зависимостей топологических состояний проводились методом ФЭСУР на установке  $\mu$ -Laser в ARPES-центре синхротронного излучения HiSOR (Хиросима, Япония) с улучшенным угловым и энергетическим разрешением и высоким пространственным разрешением лазерного пучка (диаметр пятна около 5 мкм) при энергии излучения  $h\nu = 6.3$  эВ.

Эксперимент проводился с использованием анализатора Scienta R4000 при угле падения лазерного излучения  $50^\circ$  относительно нормали к поверхности.

Монокристаллы  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  были синтезированы вертикальным методом Бриджмена в Новосибирском государственном университете.

Чистые поверхности образцов получали сколом в сверхвысоком вакууме. Базовое давление в процессе эксперимента было на уровне  $(1-2) \cdot 10^{-11}$  мбар.

Расчеты электронной структуры были выполнены в рамках релятивистской теории функционала плотности, реализованной в коде OpenMX, где базисные функции представлены локализованными псевдоатомными орбиталями [33–35], а потенциал заменен на сохраняющий норму псевдопотенциал [36]. В расчетах была использована обменно-корреляционная энергия в PBE-версии приближения обобщенного градиента [37]. Точность численного интегрирования в реальном пространстве определялась энергией отсечки 200 Ry с критерием сходимости по полной энергии  $3 \cdot 10^{-5}$  эВ. Поверхностная зона Бриллюэна представлялась сеткой  $7 \times 7$   $k$ -точек.

Базисные функции задавались следующим образом:

$$\text{Bi}8.0 - s3p3d2f2, \text{Te}7.0 - s3p3d2f1, \text{Mn}6.0 - s3p3d2.$$

Данная нотация на примере атома висмута означает, что волновые функции задавались посредством трех примитивных орбиталей для каждого  $s$ - и  $p$ -каналов, двух орбиталей для  $d$ -каналов и одной орбитали для  $f$ -каналов радиусом 8.0 ат. ед. Метод DFT+U [38] в схеме Дударева [39] использовался для  $d$ -состояний Mn с параметром  $U = 5$  эВ [20].

Рассчитываемая система представляла собой повторяющийся слэб (пластина образца), состоящий из шести семислойных блоков  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ .

Между слэбами помещался вакуумный слой толщиной 12 Å, для предотвращения взаимодействия между ними. Однородное внешнее электрическое поле пилообразной формы прикладывалось вдоль нормали к поверхности совместно с граничными условиями «вакуум–слэб–вакуум» в рамках метода эффективной экранирующей среды [40], чтобы избежать искусственного взаимодействия между слэбами. Спиновые магнитные моменты атомов рассчитывались исходя из разности населенностей по Малликену.

**Финансирование.** Работа выполнена в рамках финансовой поддержки Министерства науки и высшего образования РФ (грант № 075-15-2020-797 (13.1902.21.0024)).

## ЛИТЕРАТУРА

1. X. L. Qi, T. L. Hughes, and S. C. Zhang, Phys. Rev. B **78**, 195424 (2008).
2. X. L. Qi and S. C. Zhang, Rev. Mod. Phys. **83**, 1057 (2011).
3. C. X. Liu, S. C. Zhang, and X. L. Qi, Ann. Rev. Condens. Matter Phys. **7**, 301 (2016).
4. Y. Tokura, K. Yasuda, and A. Tsukazaki, Nature Rev. Phys. **1**, 126 (2019).
5. C. Z. Chang and M. Li, J. Phys.: Condens. Matter **28**, 123002 (2016).
6. J. Wang, B. Lian, X. L. Qi, and S. C. Zhang, Phys. Rev. B **92**, 081107 (2015).
7. Y. Deng, Y. Yu, M. Z. Shi et al., Science **367**, 895 (2020).
8. A. M. Essin, J. E. 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 et al., Phys. Rev. B **83**, 085108 (2011).
11. D. Xiao, J. Jiang, J. H. Shin et al., Phys. Rev. Lett. **120**, 056801 (2018).
12. S. Grauer, K. M. Fijalkowski, S. Schreyeck et al., Phys. Rev. Lett. **118**, 246801 (2017).
13. T. Morimoto, A. Furusaki, and N. Nagaosa, Phys. Rev. B **92**, 085113 (2015).
14. K. Nomura and N. Nagaosa, Phys. Rev. Lett. **106**, 166802 (2011).

15. S. Y. Xu, M. Neupane, C. Liu et al., *Nature Phys.* **8**, 616 (2012).
16. Y. L. Chen, J. H. Chu, J. G. Analytis et al., *Science* **329**, 659 (2010).
17. J. Henk, M. Flieger, I. V. Maznichenko et al., *Phys. Rev. Lett.* **109**, 076801 (2012).
18. A. M. Shikin, A. A. Rybkina, D. A. Estyunin et al., *Phys. Rev. B* **97**, 245407 (2018).
19. A. M. Shikin, D. A. Estyunin, Yu. I. Surnin et al., *Sci. Rep.* **18**, 4813 (2019).
20. M. M. Otrokov, I. I. Klimovskikh, H. Bentmann et al., *Nature* **576**, 416 (2019).
21. D. Zhang, M. Shi, T. Zhu et al., *Phys. Rev. Lett.* **122**, 206401 (2019).
22. J. Li, Y. Li, S. Du et al., *Sci. Adv.* **5**, eaaw5685 (2019).
23. Y. Gong, J. Guo, J. Li et al., *Chinese Phys. Lett.* **36**, 076801 (2019).
24. S. H. Lee, Y. Zhu, Y. Wang et al., *Phys. Rev. Res.* **1**, 012011 (2019).
25. Z. S. Aliev, I. R. Amiraslanov, D. I. Nasonova et al., *J. Alloys Comp.* **789**, 443 (2019).
26. Y. J. Hao, P. Liu, Y. Feng et al., *Phys. Rev. X* **9**, 041038 (2019).
27. Y. J. Chen, L. X. Xu, J. H. Li et al., *Phys. Rev. X* **9**, 041040 (2019).
28. P. Swatek, Y. Wu, L.-L. Wang et al., *Phys. Rev. B* **101**, 161109 (2020).
29. D. A. Estyunin, I. I. Klimovskikh, A. M. Shikin et al., *APL Mater.* **8**, 021105 (2020).
30. A. M. Shikin, D. A. Estyunin, I. I. Klimovskikh et al., *Sci. Rep.* **10**, 13226 (2020).
31. A. M. Shikin, D. A. Estyunin, N. L. Zaitsev et al., *Phys. Rev. B* **104**, 115168 (2021).
32. S. Y. Xu, Y. Xia, L. A. Wray et al., *Science* **332**, 560 (2011).
33. T. Ozaki, *Phys. Rev. B* **67**, 155108 (2003).
34. T. Ozaki and H. Kino, *Phys. Rev. B* **69**, 195113 (2004).
35. T. Ozaki and H. Kino, *Phys. Rev. B* **72**, 045121 (2005).
36. N. Troullier and J. L. Martins, *Phys. Rev. B* **43**, 1993 (1991).
37. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
38. M. J. Han, T. Ozaki, and J. Yu, *Phys. Rev. B* **73**, 045110 (2006).
39. S. L. Dudarev, G. A. Botton, S. Y. Savrasov et al., *Phys. Rev. B* **57**, 1505 (1998).
40. M. Otani and O. Sugino, *Phys. Rev. B* **73**, 111407 (2006).