Письма в ЖЭТФ, том 109, вып. 2, с. 98 – 104

Особенности электронной структуры топологического изолятора Bi_2Se_3, дискретно легированного атомами $3d$-переходных металлов[1)]

Э. Т. Кулатов[+*], *В. Н. Меньшов*[×], *В. В. Тугушев*[*], *Ю. А. Успенский*[* 2)]

[+]*Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, 119991 Москва, Россия*

[*]*Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия*

[×]*Donostia International Physics Center (DIPC), 20018 San Sebastian, Basque Country, Spain*

Поступила в редакцию 12 октября 2018 г.
После переработки 19 ноября 2018 г.
Принята к публикации 21 ноября 2018 г.

Методом функционала плотности рассчитаны электронные и оптические спектры топологического изолятора Bi_2Se_3, селективно легированного атомами V, Cr, Mn, Fe и Co. Показано, что вставка магнитных атомов в отдельные дельта-слои (один на 2–9 пятислойников Bi_2Se_3) многократно усиливает магнитные эффекты. Наиболее подробно изучено легирование Mn, при котором реализуется ферромагнитное упорядочение спинов. Отмечена чувствительность спинового порядка к концентрации и расположению магнитных атомов. Изучение аналитической модели, где электроны Bi_2Se_3 резонансно рассеиваются на атомном слое переходного металла, также указывает на существование спин-поляризованных состояний в области щели Bi_2Se_3. Как показывают наши первопринципные расчеты, наличие конгруэнтных ветвей электронного спектра вблизи уровня Ферми приводит к особенностям оптической проводимости при $\hbar\omega \approx 0.15{-}0.3$ эВ, к появлению инфракрасного плазмона и к углу Керра $\theta_K > 12^\circ$ в инфракрасной области спектра.

DOI: 10.1134/S0370274X19020061

Введение. Неупорядоченные сплавы на основе узкощелевых полупроводников – халькогенидов висмута и сурьмы со структурой тетрадимита типа $(Bi,Sb)_2(Se,Te)_3$, легированных $3d$-магнитными переходными металлами (Cr, Mn, Fe, Co), – изучаются достаточно давно (см, например, [1, 2]). На начальном этапе исследований главное внимание теоретиков и экспериментаторов привлекали магнитные и магнито-транспортные аспекты их поведения (в первую очередь, формирование магнитных моментов, механизмы магнитного упорядочения и спинового транспорта) как необычных представителей группы разбавленных магнитных полупроводников (РМП). В последнее время, однако, центр тяжести сместился в область квантовых транспортных явлений, обусловленных принадлежностью многих систем на основе $(Bi,Sb)_2(Se,Te)_3$ к классу трехмерных (3М) магнитных топологических изоляторов (МТИ) [3, 4]. Изучение взаимосвязи топологического и магнитного порядка в 3М МТИ стало одним из актуальных направлений физики твердого тела в свете обнаружения в них таких экзотических квантовых явлений, как квантовый аномальный эффект Холла (КАЭХ) [5–7] и топологический магнитоэлектрический эффект [8–10], перспективных для спинтроники [11].

Попытки использования тонких пленок 3М МТИ в форме РМП для реализации в них КАЭХ выявили ряд принципиальных ограничений, приводящих к нестабильности и крайне низкой температуре существования КАЭХ (см. [12, 13]). В работе [14] был предложен новый тип структур для реализации КАЭХ на основе 3М МТИ, основанный на использовании магнитных дискретных сплавов (МДС). В процессе эпитаксиального роста обогащенные ионами Cr ультратонкие слои (магнитные дельта-вставки) регулярно встраивались в пленку $(Bi,Sb)_2(Se,Te)_3$ с помощью селективного легирования. Благодаря локально высокой концентрации ионов Cr в дельта-вставках и уменьшению сплавного беспорядка, удалось усилить обменное расщепление в электронном спектре МДС по сравнению с РМП и поднять температуру наблюдения КАЭХ до 2 K. Сделанные на образцах [14] магнитооптические измерения зафиксировали топологический магнитоэлектрический эффект [15]. Недавно технология се-

[1)]См. дополнительные материалы к данной статье на сайте нашего журнала www.jetpletters.ac.ru

[2)]e-mail: uspenski@lpi.ru

лективного легирования была успешно использована для создания ассимметричных МДС со слоями, обогащенными ионами либо Cr, либо V. В этих структурах при перемагничивании во внешнем поле наблюдалось плато с нулевой проводимостью Холла как признак состояния аксионного изолятора [16–18].

Наблюдавшаяся в [14] зависимость КАЭХ от расположения дельта-вставок в образце была объяснена в теоретической работе [19]. В ней было показано, что спиновая поляризация топологических состояний чувствительна к расположению магнитных вставок в топологическом изоляторе (ТИ), причем оптимальная для КАЭХ конфигурация зависит от параметров ТИ, его толщины и скачка потенциала на интерфейсах. При этом игнорировалась возможность формирования квазидвумерных спин-поляризованных электронных состояний, локализованных вблизи дельта-вставок [20]. Такие состояния могут возникнуть за счет гибридизации $3d$-орбиталей атомов дельта-вставки и $5(s,p)$-орбиталей матрицы 3М МТИ. Наличие двух разных групп взаимодействующих электронных состояний, одна из которых отвечает за топологический, а другая – за магнитный порядок, является важной спецификой МДС на основе 3М ТИ, определяющей магнитные, спин-транспортные и магнитооптические свойства этой системы.

В настоящей работе, демонстрирующей одну из начальных попыток количественного описания подобных структур, мы выполняем расчет системы из "первых принципов", что дает понимание ряда особенностей ее электронного спектра и оптических свойств. Рассматривается структура, в которой пятислойники Bi_2Se_3, легированные ионами $3d$-магнитного переходного металла (магнитные дельта-вставки), периодически встраиваются в матрицу нелегированного Bi_2Se_3. Номинальный химический состав структуры дается формулой $(Bi_{2(1-x)}Me_{2x}Se_3)/(Bi_2Se_3)_n$. Тип металла Me = (V, Cr, Mn, Fe, Co), концентрация магнитных атомов в дельта-вставках $0 < x < 1$ и число нелегированных пятислойников матрицы $n = 1, 2, 3, \ldots$ считаются параметрами задачи, а вопрос об устойчивости самой структуры не обсуждается. Эти исследования дополняются аналитическим изучением спин-поляризованных электронных состояний вблизи дельта-вставки, выполненным в рамках модельного гамильтониана.

Электронный спектр МДС на основе Bi_2Se_3. Электронные свойства МДС $(Bi_{2(1-x)}Me_{2x}Se_3)/(Bi_2Se_3)_n$ с $x = 0.5$ и 1.0, $n = 1–5, 8$ и Me = V, Cr, Mn, Fe, Co были вычислены с помощью кодов VASP и WIEN2k в рамках теории функционала плотности (приближение GGA) с учетом спиновой поляризации электронов и спин-орбитального взаимодействия (СОВ). Более подробное описание техники расчетов дано в дополнительных материалах. Расчеты показали, что замещение атомов Bi на атомы металла уменьшает толщину легированного пятислойника на $\sim 30\,\%$. Это хорошо заметно на рис. 1, где представлены

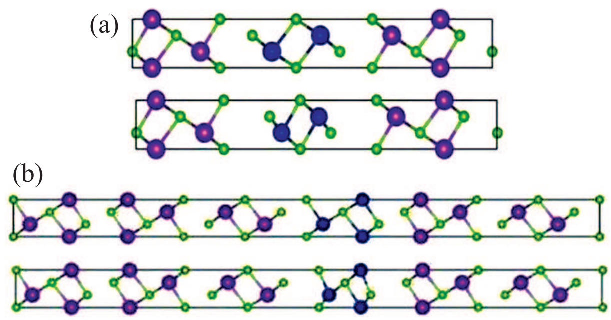

Рис. 1. (Цветной онлайн) Суперячейки МДС $(Mn_2Se_3)/(Bi_2Se_3)_n$ до (выше) и после релаксации (ниже): (a) – $n = 2$; (b) – $n = 5$. Атомы Bi показаны фиолетовыми кружками, Se – зелеными, Mn – синими. Ось z направлена по горизонтали

структуры МДС $(Mn_2Se_3)/(Bi_2Se_3)_n$ с $n = 2$ и 5 до и после атомной релаксации. Такой же эффект наблюдался и при релаксации остальных структур с $x = 0.5$, 1.0 и $n = 1, 3, 4, 8$.

Зонная структура ТИ Bi_2Se_3 характеризуется наличием прямой диэлектрической щели шириной 0.2 эВ в точке Γ (рис. 2a). В МДС $(Mn_2Se_3)(Bi_2Se_3)_2$ валентная зона и зона проводимости, соответствующие электронам со спином вверх, перекрываются: максимум валентной зоны поднимается выше уровня Ферми ($E_{\rm F}$), а минимум зоны проводимости опускается на уровень Ферми. Для электронов со спином вниз диэлектрическая щель сохраняется (небольшая плотность состояний со спином вниз наводится в щели за счет СОВ), т.е. $(Mn_2Se_3)(Bi_2Se_3)_2$ обладает спектром полуметаллического ферромагнетика (*half-metallic ferromagnet*) (рис. 2b, c). Анализ плотности $3d$-электронных состояний Mn (рис. 2d) показывает, что $3d\uparrow$- и $3d\downarrow$-зоны имеют ширину ~ 2 эВ, а их центры отстоят от $E_{\rm F}$ на -3.1 эВ и $+1.2$ эВ соответственно, т.е. обменное расщепление $\Delta_{xc} = 4.3$ эВ. В ферромагнитном (ФМ) состоянии $3d\uparrow$-зона $(Mn_2Se_3)(Bi_2Se_3)_2$ заполнена почти полностью, что отвечает полному магнитному моменту $M_{\rm tot} = 8\,\mu_{\rm B}$/cell. Те же особенности электронного спектра характерны для структу-

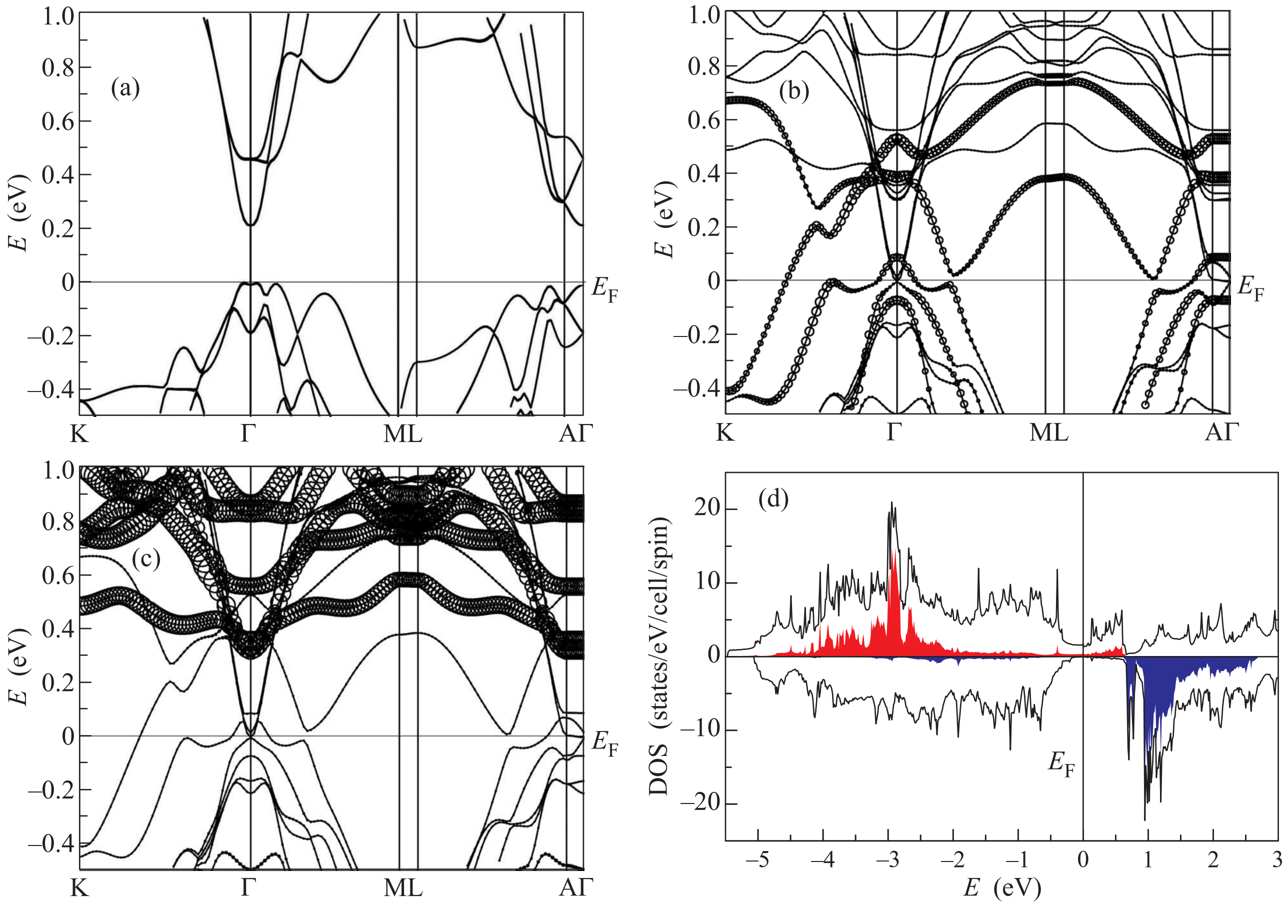

Рис. 2. (Цветной онлайн) Зонный спектр и плотность состояний (ПС): (a) – кристалла Bi_2Se_3; (b), (c) – МДС $(Mn_2Se_3)/(Bi_2Se_3)_2$ в окрестности уровня Ферми (размер кружков на дисперсионных кривых характеризует вклад $3d$-состояний Mn). (d) – ПС в $(Mn_2Se_3)/(Bi_2Se_3)_2$: черная линия – полная ПС, красная и синяя области – вклады в ПС $3d$-состояний Mn со спином вверх и вниз, соответственно

ры $(Mn_2Se_3)(Bi_2Se_3)_5$ (рис. 3c) и для более сложных ДМС $(Bi_{2(1-x)}Mn_{2x}Se_3)/(Bi_2Se_3)_n$ с варьируемыми x и n.

Замена в дельта-слоях атомов Mn на другой переходный элемент Me = V, Cr, Fe, Co приводит к существенному изменению электронной структуры МДС $(Bi_{2(1-x)}Me_{2x}Se_3)/(Bi_2Se_3)_n$ (см. дополнительные материалы, рис. S2). В случае ванадия, центры $3d$-зон со спином вверх (вниз) располагаются существенно выше, чем при легировании Mn, на энергиях -0.3 эВ ($+1.8$ эВ) относительно E_F. При замене атомов Mn на хром (Me = Cr) эти зоны располагаются все еще достаточно высоко на энергиях -1.0 эВ ($+1.8$ эВ). В этих случаях, как и при легировании Bi_2Se_3 атомами Mn, электронные спектры МДС в ФМ состоянии имеют характер полуметаллического ферромагнетика (ПМФМ). Легирование атомами Fe и Co сдвигает центры $3d$-зон со спином вверх (вниз) значительно ниже, до энергий -2.2 эВ (-0.2 эВ) и -1.2 эВ (-0.8 эВ), соответственно. В результате $3d$-зоны оказываются почти целиком в области энергий валентной зоны Bi_2Se_3, что ведет к их почти полному заполнению и уширению до 3.0–3.5 эВ. Меняется и характер электронного спектра, который в случаях Me = Fe, Co имеет металлический тип.

Расчет спинового упорядочения в МДС $(Bi_{2(1-x)}Me_{2x}Se_3)/(Bi_2Se_3)_n$ требует рассмотрения более сложных конфигураций замещения атомов Bi атомами переходного металла. Чтобы вычислить разность полных энергий коллинеарных ферро- и антиферромагнитных (ФМ и АФМ) состояний $\Delta E = E_{AFM} - E_{FM}$, характеризующую магнитную энергию структуры, нужна суперячейка, содержащая не менее 2 атомов Me. Для этой цели мы использовали суперячейку, содержащую 6 пятислойников. В простейшем случае оба атома Me расположены в разных слоях Bi одного и того же пятислойника. Они отделены друг от друга по z

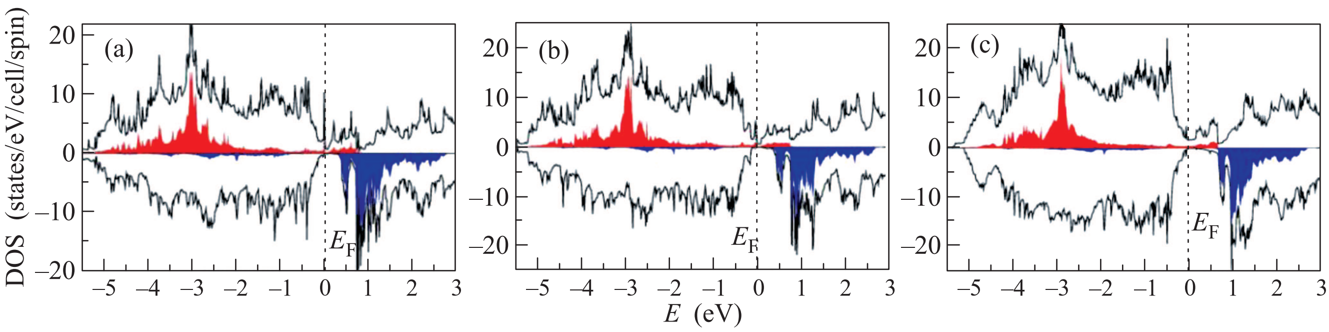

Рис. 3. (Цветной онлайн) ПС $(Mn_2Se_3)/(Bi_2Se_3)_n$: (a) – $n = 3$; (b) – $n = 4$, (c) – $n = 5$. Обозначения те же, что на рис. 2d

расстоянием $\Delta z = 4.57$ Å. Если атомы Me находятся в соседних пятислойниках, расстояние между ними может составлять $\Delta z = 5.71$ Å, 9.86 Å и 13.6 Å. Были рассмотрены также варианты, когда атомы Me разделялись одним пятислойником Bi_2Se_3 ($\Delta z = 19.3$ Å) и двумя пятислойниками ($\Delta z = 28.7$ Å). Из результатов расчетов, собранных в табл. 1, видно, что максимальное по модулю значение ΔE, составляющее десятки или даже сотни мэВ/яч, почти всегда наблюдается при наименьшем расстоянии между магнитными атомами $\Delta z = 4.57$ Å, тогда как при больших расстояниях Δz магнитная энергия, как правило, составляет всего несколько мэВ/яч (см. графическую иллюстрацию табл. 1 в дополнительных материалах, рис. S1). Тип магнитного упорядочения, отвечающий наименьшей энергии МДС, существенно зависит как от расстояния между магнитными атомами Δz, так и от легирующего $3d$-переходного элемента. Наши расчеты показывают, что ФМ упорядочение наиболее стабильно при замещении Bi на Mn. В конфигурации с $\Delta z = 4.57$ Å величина ΔE достигает +452 мэВ, что указывает на возможность ФМ состояния такой структуры при комнатной температуре. При замещении висмута атомами других переходных металлов превалирует тенденция к образованию АФМ состояния, поэтому именно замещение марганцем было исследовано нами особенно подробно. Отметим также, что при ФМ упорядочении спинов полный магнитный момент, приходящийся на один $3d$-атом, в МДС $(Bi_{2(1-x)}Me_{2x}Se_3)/(Bi_2Se_3)_n$ с Me = V, Cr и Mn не зависит от конкретного расположения магнитных атомов. Такая нечувствительность обусловлена электронным спектром ПМФМ типа в этих МДС.

Для структур $(Mn_2Se_3)/(Bi_2Se_3)_n$ с $n = 1$–5, 8 была проанализирована зависимость ΔE от n, т.е. от толщины буферной прослойки между магнитными пятислойниками. Из-за небольших изменений ПС

Таблица 1. Магнитные свойства МДС $(Me_2Se_3)/(Bi_2Se_3)_n$ с Me = V, Cr, Mn, Fe, Co: разность энергий АФМ и ФМ состояний $\Delta E = E_{AFM} - E_{FM}$ и полный магнитный момент M_{tot}, рассчитанный для конфигурации с $\Delta z = 4.57$ Å

Δz (Å)	ΔE (мэВ/яч)				
	Me = V	Me = Cr	Me = Mn	Me = Fe	Me = Co
4.57	−70.0	−24.0	+452.0	+22.0	−2.0
5.71		+1.3	+32.2	−6.9	−5.1
9.86		+3.4	+8.4	−2.7	−12.5
13.6		+3.5	+14.2	−6.0	−1.8
19.3		+4.2	+8.0	+5.1	–
28.7		−4.3	−0.6	+3.8	−0.9
M_{tot} (μ_B/cell)	4	6	8	4	2

вблизи E_F при варьировании n, которые можно заметить при сравнении рис. 2d и рис. 3a, она оказалась нерегулярной. При $n = 1$–5 и 8 соответствующие значения ΔE (в мэВ) равны: +448, +452, +45, +62, +366 и +368. Провал ΔE при $n = 3$, 4 может быть объяснен появлением в этих МДС локального пика ПС со спином вверх на уровне Ферми (рис. 3a, b), что повышает энергию ФМ состояния и снижает его устойчивость.

Для МДС $(Bi_{2(1-x)}Mn_{2x}Se_3)/(Bi_2Se_3)_2$ мы исследовали влияние x (концентрации Mn) на магнитную энергию $\Delta E = E_{AFM} - E_{FM}$. Для этого была сконструирована суперячейка $2\times2\times1$ (с удвоением вдоль направлений x и y) и с замещением половины атомов Bi на Mn в одной плоскости ($x = 0.5$). При этом, как оказалось, ΔE становится отрицательной, равной −14 мэВ. То есть некомпенсированное АФМ (ферримагнитное) состояние с $M_{tot} = 2\,\mu_B$/cell становится выгоднее ферромагнитного с $M_{tot} = 8\,\mu_B$/cell. При полном же замещении атомов Bi на Mn в одной плоскости пятислойника ферромагнетизм оказывается энергетически предпочтительным, $\Delta E =$ $= +113$ мэВ. Более низкая концентрация $x = 0.22$

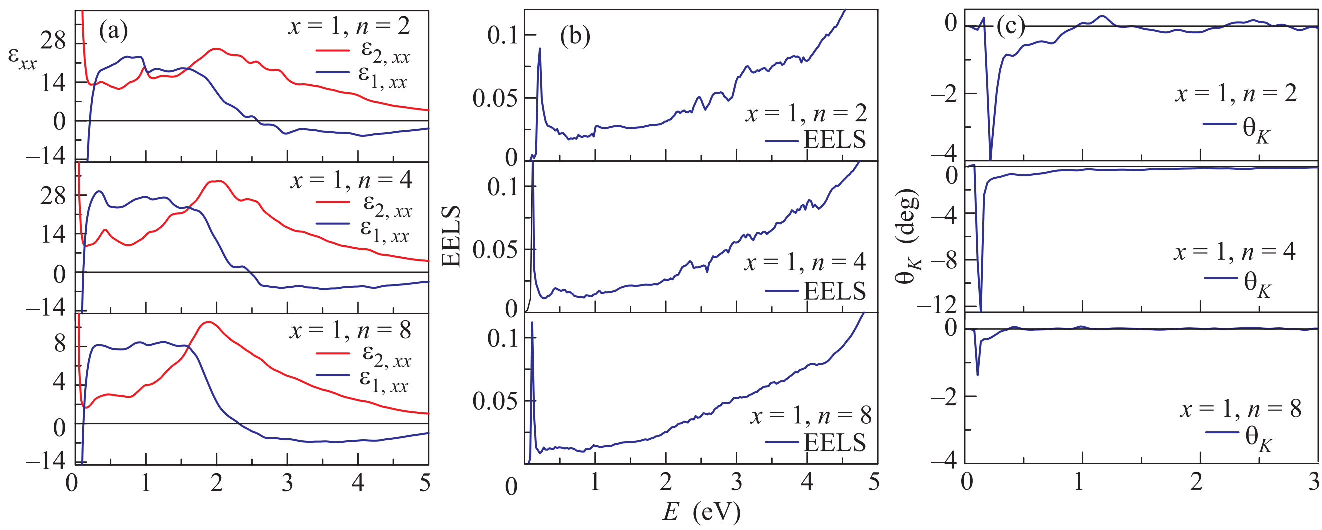

Рис. 4. (Цветной онлайн) Оптические спектры МДС $(Mn_2Se_3)/(Bi_2Se_3)_n$. (a) – Действительная и мнимая части диэлектрической проницаемости: $\varepsilon_1(\omega)$ (синяя) и $\varepsilon_2(\omega)$ (красная линия). (b) – Функция характеристических потерь – EELS. (c) – Магнитооптический полярный эффект Керра

может быть получена при использовании суперячейки (с утроением вдоль направлений x и y) и с замещением двух атомов Bi (из девяти) на атомы Mn в одной Bi-плоскости. В этом случае ФМ состояние с магнитным моментом $M_{\rm tot} = 8\,\mu_{\rm B}/{\rm cell}$ также оказывается более выгодным $\Delta E = +23$ мэВ.

Для понимания механизма взаимодействия топологических и магнитных степеней свободы в МДС $(Bi_{2(1-x)}Me_{2x}Se_3)/(Bi_2Se_3)_n$ мы рассмотрели модельную систему, в которой атомный слой из примесей Андерсона вставлен в матрицу Bi_2Se_3. Гамильтониан системы имеет вид:

$$H = \sum\nolimits_{\mathbf{k}} [\Xi - bk^2)\tau_z + A\tau_x \otimes (\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{k})] p^{+}_{\sigma\tau\mathbf{k}} p_{\sigma'\tau\mathbf{k}} + $$

$$+ H_{dd} + H_{pd} + W_{pp'}. \qquad (1)$$

Первый член (1) описывает движение p-электронов в матрице Bi_2Se_3. Волновой вектор $\mathbf{k} = (\boldsymbol{\kappa}, k_z)$ имеет компоненты, параллельные и перпендикулярные (вдоль оси z) к плоскости вставки. При условии $B\Xi > 0$ зоны имеют инвертированный порядок вблизи точки $\mathbf{k} = 0$, что соответствует топологической природе Bi_2Se_3. Матрицы σ_α и τ_α $(\alpha = x, y, z)$ являются матрицами Паули, действующими в спиновом и орбитальном пространстве. Им отвечают индексы $\tau, \tau' = +, -$ и $\sigma, \sigma' = \uparrow, \downarrow$. Остальные члены гамильтониана H_{dd}, H_{pd} и $W_{pp'}$ описывают соответственно: d-электроны в примесном слое, имеющие расщепленные по спину энергии $\varepsilon^d_\sigma = \varepsilon^d + U\langle n^d_{-\sigma}\rangle$; гибридизацию p- и d-электронов; рассеяние p-электронов на возмущении кристаллического потенциала вблизи дельта-вставки.

Рассмотрим ситуацию, когда $\varepsilon^d < E_{\rm F} < \varepsilon^d + U\langle n^d_\downarrow\rangle$ и спиновое расщепление U достаточно сильное, больше ширины примесной d-зоны, что соответствует легированию Bi_2Se_3 атомами V, Cr и Mn. Если в (1) пренебречь членом $W_{pp'}$, спектр электронов можно оценить аналитически. При слабой $p{-}d$ гибридизации от валентной зоны и зоны проводимости Bi_2Se_3 отщепляются две пары состояний, располагающиеся очень близко к краям щели ТИ. При сильной гибридизации внутри запрещенной зоны возникают четыре дисперсионные ветви $\omega_{\sigma\tau}(\boldsymbol{\kappa})$ с параболическим законом дисперсии вблизи $\boldsymbol{\kappa} = 0$. При сравнительно больших импульсах $\boldsymbol{\kappa}$ эти ветви переходят в дираковский спектр $\omega_{\uparrow\tau}(\kappa) = -A\kappa$ и $\omega_{\downarrow\tau}(\kappa) = A\kappa$. Включение $W_{pp'}$ сдвигает уровни $\omega_{\sigma\tau}(0)$ по энергии и может "вытолкнуть" индуцированные состояния из щели в континуум, как это имеет место для интерфейсных состояний на границе между ТИ и нормальным изолятором (см. [7] в дополнительных материалах). Более подробный анализ нашей модельной системы дан в дополнительных материалах.

Оптические свойства. Расчеты тензора диэлектрической проницаемости (ДП) $\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega) = \varepsilon_{1,\alpha\beta}(\omega) + i\varepsilon_{2,\alpha\beta}(\omega)$ были проведены для МДС $(Mn_2Se_3)/(Bi_2Se_3)_n$ с $n = 2$, 4 и 8 в широком интервале энергий фотонов $\hbar\omega < 21.8$ эВ. Метод расчета ДП и оптических свойств кристаллов подробно описан в нашей статье [21]. Зонные энергии и электронные волновые функции рассчитывались с учетом эффектов СОВ, а интегрирование по неприводимой части зоны Бриллюэна выполнялось методом тетраэдров с использованием ~ 500 **k**-точек. На рисунке 4 представлены результаты расчетов следующих величин: $\varepsilon_{1,xx}(\omega)$, $\varepsilon_{1,zz}(\omega)$, $\varepsilon_{2,xx}(\omega)$ и $\varepsilon_{2,zz}(\omega)$, а также функции характеристических потерь (EELS) и угла магнитооптического вращения Керра $\theta_K(\omega)$. На всех трех зависимостях $\varepsilon_{2,xx}(\omega)$ виден максимум с $\hbar\omega \approx 0.3$ эВ, особенно заметный в МДС с $n = 4$ (рис. 4a). Данный максимум обусловлен электронными переходами между конгруэнтными ветвями электронного спектра, центрированными около точки Γ (рис. 2b, c). Эти же межзонные переходы и внутризонные переходы электронов со спином вверх служат причиной изменения знака $\varepsilon_{1,xx}(\omega)$ при $\hbar\omega \approx 0.1{-}0.2$ эВ. Нулевому значению $\varepsilon_{1,xx}(\omega)$ соответствует плазменный пик функции характеристических потерь (рис. 4b), минимум коэффициента отражения и наибольшая глубина проникновения света в образец. Именно максимальная глубина проникновения определяет большое значение $\theta_K(\omega)$ на этой частоте, достигающее огромной величины $\theta_K = -12^\circ$ в ДМС с $n = 4$ (рис. 4c). Отметим, что второй нуль функции $\varepsilon_{1,xx}(\omega)$, приходящийся на энергию $\hbar\omega \approx 2.5$ эВ, попадает в область сильного поглощения. Он приводит лишь к плавному увеличению характеристических потерь и слабо проявляется в эффекте Керра.

Заключение. Наши первопринципные расчеты показали, что в МДС $(Bi_{2(1-x)}Me_{2x}Se_3)/(Bi_2Se_3)_n$ с Me = V, Cr и Mn $3d$-электроны со спином вниз практически отсутствуют. Эти МДС при ФМ упорядочении спинов имеют спектр, типичный для полуметаллических ферромагнетиков (щель – для электронов со спином вниз). В них полный магнитный момент, приходящийся на один $3d$-атом, всегда равен целому числу μ_B, не зависит от деталей расположения магнитных дельта-вставок и от концентрации в них магнитных атомов. В МДС же с Me = Fe и Co, $3d$-зоны со спином вверх и вниз почти полностью заполнены и сильно гибридизованы с валентной зоной Bi_2Se_3, так что электронный спектр имеет металлический характер. Расчеты магнитной энергии $\Delta E = E_{\rm AFM} - E_{\rm FM}$, выполненные для большого числа МДС $(Bi_{2(1-x)}Me_{2x}Se_3)/(Bi_2Se_3)_n$, свидетельствуют, что величина и знак ΔE чувствительны к расположению магнитных атомов и к легирующему $3d$-элементу. ФМ упорядочение наиболее стабильно в МДС с Me = Mn. При расстоянии между слоями марганца $\Delta z \approx 0.46$ нм, величина $\Delta E = 452$ мэВ/яч, что указывает на ФМ упорядочение даже при комнатной температуре. Если же магнитные слои отстоят друг от друга на $\Delta z > 1.5$ нм, их магнитное взаимодействие очень слабое, $\Delta E \approx 1{-}5$ мэВ/яч. Ориентация спинов в таких слоях легко меняется внешним магнитным полем, что использовалось в экспериментах [14, 16]. В целом, знак ΔE сложно зависит от концентрации и распределения $3d$-атомов, однако МДС с V, Cr, Fe и Co чаще имеют АФМ порядок. Аналитическое рассмотрение модели изолированной магнитной дельта-вставки в матрице ТИ с параметрами, соответствующими легированию Mn, указывает на существование спин-поляризованных состояний в щели ТИ, что согласуется с первопринципными расчетами МДС с V, Cr и Mn. Наши первопринципные расчеты показали, что переходы между конгруэнтными ветвями электронного спектра МДС $(Mn_2Se_3)/(Bi_2Se_3)_n$ индуцируют ИК особенности оптических спектров, в частности, очень высокую магнитооптическую активность в ИК области. Мы надеемся, что эти интересные для спинтроники результаты стимулируют экспериментальные исследования.

Исследование выполнено за счет грантов Российского фонда фудаментальных исследований (проекты # 16-02-00612а, 16-02-00024а, 17-02-00725а) и программ Президиума РАН (координаторы А.Ф. Андреев, В.М. Пудалов и С.М. Стишов). Авторы выражают благодарность за обсуждение результатов расчетов Л.А. Асланову (химфак МГУ им. М.В. Ломоносова). Работа была выполнена с использованием суперкомпьютерных ресурсов Межведомственного Суперкомпьютерного Центра РАН (МСЦ РАН).

1. Y. S. 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).
2. L. Cheng, Z.-G. Chen, S. Ma, Z.-D. Zhang, Y. Wang, H.-Yi Xu, L. Yang, G. Han, K. Jack, G. (Max) Lu, and J. Zou, J. Am. Chem. Soc. **134**, 18920 (2012).
3. M. Z. Hasan, and C. L. Kane, Rev. Mod. Phys. **82**, 3045(2010).
4. X. L. Qi, and S. C. Zhang, Rev. Mod. Phys. **83**, 1057(2011).
5. X. L. Qi, T. L. Hughes, and S. C. Zhang, Phys. Rev. B **78**, 195424 (2008).
6. I. Garate and M. Franz, Phys. Rev. Lett. **104**, 146802(2010).
7. R. Yu, W. Zhang, H. J. Zhang, S.-C. Zhang, X. Dai, and Z. Fang, Science **329**, 61(2010).
8. X. L. Qi, T. L. Hughes, and S. C. Zhang, Phys. Rev. B **78**, 195424 (2008).
9. J. Wang, B. Lian, X. L. Qi, and S. C. Zhang, Phys. Rev. B **92**, 081107 (2015).

10. T. Morimoto, A. Furusaki, and N. Nagaosa, Phys. Rev. B **92**, 085113 (2015).
11. D. Pesin and A. H. MacDonald, Nat. Mater. Î1, 409 (2012).
12. V. N. Men'shov, V. V. Tugushev, and E. N. Chulkov, Europhys. Lett. **114**, 37003 (2016).
13. M. Winnerlein, S. Schreyeck, S. Grauer, S. Rosenberger, K. M. Fijalkowski, C. Gould, K. Brunner, and L. W. Molenkamp, Phys. Rev. Materials **1**, 011201 (2017).
14. M. Mogi, R. Yoshimi, A. Tsukazaki, K. Yasuda, Y. Kozuka, K. S. Takahashi, M. Kawasaki, and Y. Tokura, Appl. Phys. Lett. **107**, 182401 (2015).
15. K. N. Okada, Y. Takahashi, M. Mogi, R. Yoshimi, A. Tsukazaki, K. S. Takahashi, N. Ogawa, M. Kawasaki, and Y. Tokura, Nat. Commun. **7**, 12245 (2016).
16. M. Mogi, M. Kawamura, R. Yoshimi, A. Tsukazaki, Y. Kozuka, N. Shirakawa, K. S. Takahashi, M. Kawasaki, and Y. Tokura, Nat. Mater. **16**, 516 (2017).
17. M. Mogi, M. Kawamura, A. Tsukazaki, R. Yoshimi, K. S. Takahashi, M. Kawasaki, and Y. Tokura, Sci. Adv. **3**, eaao1669 (2017).
18. D. Xiao, J. Jiang, J.-H. Shin, W. Wang, F. Wang, Y.-F. Zhao, C. Liu, W. Wu, M. H. W. Chan, N. Samarth, and C.-Z. Chang, Phys. Rev. Lett. **120**, 056801 (2018).
19. В. Н. Меньшов, В. В. Тугушев, Е. В. Чулков, Письма в ЖЭТФ **104**, 480 (2016).
20. V. N. Men'shov, V. V. Tugushev, and E. V. Chulkov, JETP Lett. **96**, 445 (2012) [Письма в ЖЭТФ **96**, 492 (2012)].
21. Yu. A. Uspenskii, E. T. Kulatov, and S. V. Halilov, Phys. Rev. B **54**, 474 (1996).