Письма в ЖЭТФ, том 114, вып. 11, с. 768 – 776

Особенности поверхностных состояний собственного антиферромагнитного топологического изолятора с неколлинеарной текстурой доменных стенок

В. Н. Меньшов[+*×1)], *И. П. Русинов*[+*], *Е. В. Чулков*[+*○]

[+] *Томский государственный университет, 634050 Томск, Россия*

[*] *Санкт-Петербургский государственный университет, 199034 С.-Петербург, Россия*

[×] *Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", 123182 Москва, Россия*

[○] *Departamento de Polimeros y Materiales Avanzados: Fisica, Quimica y Tecnologia, Facultad de Ciencias Quimicas, Universidad del Pais Vasco UPV/EHU, 20080 San Sebastian/Donostia, Basque Country, Spain*

Поступила в редакцию 15 октября 2021 г.
После переработки 27 октября 2021 г.
Принята к публикации 27 октября 2021 г.

Формирование магнитного порядка в трехмерном топологическом изоляторе проявляется в поведении электронных состояний на его границах. В настоящем исследовании мы теоретически изучаем модификацию поверхностной электронной структуры под влиянием неколлинеарной текстуры намагниченности типа доменной стенки, возникающей в собственном антиферрогмагнитном топологическом изоляторе. Показано, что помимо модуляции поверхностной обменной щели и смещения двумерного дираковского конуса в импульсном пространстве возникает связанное одномерное состояние, индуцированное доменной стенкой. Описаны основные характеристики связанного состояния, такие как энергетический спектр, спиновая поляризация и пространственная локализация, и их зависимость от взаимной ориентации намагниченностей в доменах. Мы обсуждаем способы экспериментального обнаружения одномерного состояния, связанного с доменной стенкой, и возможный вклад этого состояния в новые квантовые эффекты на поверхности антиферрогмагнитного топологического изолятора типа $MnBi_2Te_4$.

DOI: 10.31857/S1234567821230087

1. Введение. В последнее время наблюдается огромный интерес к изучению магнитных топологических изоляторов (ТИ) [1–11], материалов, в которых комбинация топологически нетривиальной зонной структуры и магнитного порядка формирует базу для новых квантовых явлений таких, как квантовый аномальный эффект Холла (КАЭХ) [12], аксионная электродинамика [13], фермионы Майорана [14, 15]. Впервые КАЭХ был обнаружен при ультранизких температурах ~ 30 мК в тонких пленках трехмерных (3D) ТИ $Cr_x(Bi,Sb)_{2-x}Te_3$ и $V_x(Bi,Sb)_{2-x}Te_3$, допированных атомами $3d$ элементов [3, 16]. Позднее применение модуляционного магнитного допирования в пленках 3D ТИ позволило стабилизировать плато квантованной проводимости в КАЭХ при температуре ~ 2 К, а также реализовать состояние аксионного изолятора [4].

Недавно был предсказан и синтезирован уникальный ван-дер-ваальсовский материал $MnBi_2Te_4$, сочетающий собственные магнитные и топологические свойства [5, 17, 18]. Спонтанный антиферромагнитный (АФМ) порядок в $MnBi_2Te_4$ придает эффектам квантованной проводимости специфику, которая не свойственна допированным ферромагнитным (ФМ) ТИ типа $(Cr,V)_x(Bi,Sb)_{2-x}Te_3$. Ярким примером является демонстрация холловской проводимости, близкой к идеальному квантованию, кратному e^2/h, при температуре 1.4 К на высококачественных образцах $MnBi_2Te_4$ толщиной пять семислойных блоков (СБ) Te-Bi-Te-Mn-Te-Bi-Te в отсутствии внешнего поля [19]. Приложение внешнего неквантующего магнитного поля, направленного перпендикулярно к базисной плоскости, приводит к увеличению температуры КАЭХ до 6.5 К [19]. Кроме того, в тонких пленках $MnBi_2Te_4$, содержащих как четное, так и нечетное число СБ, с ростом внешнего поля наблюдается последовательность метамагнитных переходов между состояниями с различными коллинеарными и неколлинеарными текстурами намагниченности, которые коррелируют с изменением обмен-

1) e-mail: vnmenshov@mail.ru

ной спектральной щели и проводимости [19–22]. Комплексные исследования [23] позволили установить соответствие между зонной структурой, магнитной текстурой и топологической фазой в ультратонких пленках $MnBi_2Te_4$ заданной толщины от 4 до 8 СБ. Было показано, что в процессе перемагничивания образцов именно в фазе с неколлинеарной текстурой намагниченности происходит топологический переход, сопровождающийся инвертированием зонных состояний [23]. Измерения электронных состояний на поверхности толстых пленок $MnBi_2Te_4$ посредством фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) дают противоречивые результаты. Одни из них показывают большую ~ 70 мэВ [5] или несколько уменьшенную от ~ 65 до ~ 15 мэВ [24, 25] щель магнитного происхождения. В других ARPES экспериментах щель в спектрах поверхностных состояний не была обнаружена [26–28], что не согласуется с теоретическими предсказаниями для идеального АФМ ТИ [5]. Вероятно, причина уменьшения или исчезновения щели в спектре поверхностных состояний реальных АФМ ТИ кроется в амплитудных и ориентационных флуктуациях обменного поля на поверхности материала [25, 27]. Сасс и соавторы [29, 30], используя магнитную силовую микроскопию, установили, что в толстых образцах $MnBi_2Te_4$ существуют антифазные АФМ домены микронного масштаба. Во внешнем поле они наблюдали ряд поверхностных спин-флоп переходов с формированием сложных неколлинеарных текстур намагниченности.

Многие свойства материалов из семейства $MnBi_2Te_4$ получили адекватное объяснение [31, 32]. Однако, как свидетельствуют перечисленные выше факты, проблема взаимосвязи топологических состояний с неколлинеарными и пространственно неоднородными магнитными текстурами остается сложной и запутанной. В частности, это касается вопроса о топологически обусловленных состояниях фермионов, связанных с магнитными доменными стенками (ДС) на поверхности собственного АФМ ТИ. В настоящей работе мы теоретически анализируем связанные состояния, которые могут возникнуть на границе между доменами с неколлинеарными намагниченностями на поверхности АФМ ТИ типа $MnBi_2Te_4$. В дальнейшем мы называем такую границу неколлинеарной ДС.

Модификация электронных состояний на поверхности АФМ ТИ под влиянием одиночной неколлинеарной ДС. Связь топологии и магнетизма проявляется в поведении электронных состояний на поверхности 3D ТИ. Известно, что магнитная ДС одновременно может служить фазовой границей, разделяющей домены с различными топологическими индексами [1]. На таких границах присутствуют так называемые топологически защищенные электронные состояния с бесщелевым спектром. В работе [33] установлено, что наличие на поверхности ТИ магнитной антифазной ДС, через которую меняется знак обменной щели и/или знак обменного сдвига точки Дирака в импульсном пространстве, сопряжено с изменением топологического индекса и, соответственно, с возникновением на этой границе одномерного (1D) связанного кирального состояния с линейным спектром, где скорость возбуждения зависит от направления магнитной анизотропии. Ниже мы изучаем актуальный вопрос о перестройке квазирелятивистских электронных состояний на поверхности АФМ ТИ под влиянием одиночной неколлинеарной ДС.

Благодаря нетривиальной топологии блоховских зон в 3D ТИ на его поверхности существуют безмассовые фермионы дираковского типа, собственный магнитный момент которых связан с направлением импульса [34]. В АФМ ТИ типа $MnBi_2Te_4$ такие фермионы подвергаются влиянию обменного поля, которое можно непосредственно связать с магнитными моментами на $3d$ атомах, образующих центральный слой в крайнем СБ, выходящем на поверхность (0001). Такое допущение вполне оправдано, поскольку топологическое поверхностное состояние локализовано главным образом в крайнем СБ [25]. Основные топологические аспекты физики поверхности АФМ ТИ могут быть описаны с использованием двумерного (2D) эффективного гамильтониана

$$H(\mathbf{k}) = -\nu([\mathbf{k}\times\boldsymbol{\sigma}]\cdot\mathbf{e}_z) + J(\mathbf{M}\cdot\boldsymbol{\sigma}), \qquad (1)$$

который действует на двухкомпонентную огибающую волновую функцию $\Theta = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$. Здесь первое слагаемое представляет низший порядок разложения энергии квазичастиц по импульсу $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$, отсчитанному от точки $\bar{\Gamma}$ в поверхностной зоне Бриллюэна, ν – скорость Ферми (предполагается, что $\hbar = 1$), $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ – спиновые матрицы Паули, $\mathbf{e}_z$ – единичный вектор, нормальный к поверхности. Чтобы избежать излишнего усложнения модели, мы пренебрегаем членами более высокого порядка по $\mathbf{k}$. Намагниченность $3d$ атомного слоя $\mathbf{M}$ (далее поверхностная намагниченность) поляризует спиновую плотность на p-орбиталях атомных слоев (Bi и Te) крайнего СБ, формирующих нетривиальные поверхностные состояния. Соответствующая обменная энергия представлена вторым слагаемым в формуле (1), где взаимодействие J предполагается изотропным и не меняющимся вдоль плоскости поверхности (x, y); для определенности считаем $J > 0$. Также полагаем, что энергии интересующих нас поверхностных состояний всегда лежат в области инвертированной запрещенной зоны объемных состояний АФМ ТИ. В однодоменной ситуации, спектр гамильтониана (1) определяется соотношением $E^2(\mathbf{k}) = (vk_x - JM_y)^2 + (vk_y + JM_x)^2 + J^2M_z^2$. Таким образом, под влиянием пространственно однородной намагниченности исходный дираковский конус $\pm E(\mathbf{k})$ в спектре поверхностных состояний может как расщепляться, так и смещаться из центра зоны Бриллюэна в зависимости от ориентации вектора $\mathbf{M} = (M_x, M_y, M_z)$.

Рассмотрим намагниченность $\mathbf{M}(x, y)$, меняющуюся в плоскости поверхности АФМ ТИ таким образом, что вектор $\mathbf{m}(x, y) = \frac{\mathbf{M}(x,y)}{M_0}$ задает ее локальную ориентацию, при этом амплитуда фиксирована, $|\mathbf{M}(x, y)| = M_0$ и $|\mathbf{m}(x, y)| = 1$. Величину M_0 можно ассоциировать с величиной намагниченности СБ в основном состоянии. Среди множества возможных распределений $\mathbf{m}(x, y)$ выделим магнитную текстуру, которая описывается кусочно-непрерывной функцией: $\mathbf{m}(x, y) = \mathbf{m}(x) = \mathbf{m}_r h(x) + \mathbf{m}_l h(-x)$, где $h(x)$ – функция Хевисайда. Это означает, что пара однородно намагниченных доменов с поляризациями $\mathbf{m}_r$ и $\mathbf{m}_l$ разделена в плоскости (x, y) жесткой ДС при $x = 0$. Намагниченности правого и левого доменов могут быть ориентированы произвольным образом по отношению к друг другу и по отношению к $\mathbf{e}_z$-оси. Наша цель – описать ключевые особенности поверхностного состояния, которое индуцировано ДС. Для этого мы решаем следующую задачу на собственные значения:

$$H(x, k_y)\Theta(x, k_y) = E_1(k_y)\Theta(x, k_y), \quad (2)$$

$$H(x, k_y) = vk_y\sigma_x + iv\sigma_y\frac{d}{dx} + JM_0(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{m}(x)), \quad (3)$$

где функция $\Theta(x, k_y)$ удовлетворяет граничным условиям, которые гарантируют, что она непрерывна: $\Theta(0+, k_y) = \Theta(0-, k_y) = \Theta(0, k_y)$ и ее производная имеет разрыв, который пропорционален скачку намагниченности на ДС,

$$iv\sigma_y\left[\left.\frac{d\Theta(x, k_y)}{dx}\right|_{0+} - \left.\frac{d\Theta(x, k_y)}{dx}\right|_{0-}\right] + {} + JM_0((\mathbf{m}_r - \mathbf{m}_l)\cdot\boldsymbol{\sigma})\Theta(0, k_y) = 0. \quad (4)$$

Записывая 1D уравнения (2)–(4), мы использовали тот факт, что система остается однородной в направлении $\mathbf{e}_y$, и поэтому импульс $\mathbf{k}_y$ сохраняется.

Не теряя общности подхода, мы ограничимся изучением неколлинеарных текстур, домены которых поляризованы в (x, z)-плоскости. Тогда, записывая соответствующие компланарные векторы в сферических координатах как $\mathbf{m}_{r,l} = (\sin\theta_{r,j}, 0, \cos\theta_{r,l})$, мы параметризуем задачу (2)–(4) парой полярных углов $\theta_{r,l}$ ($\theta_{r,l}$ – углы между векторами $\mathbf{m}_{r,l}$ и осью $\mathbf{e}_z$). Нас интересует связанное состояние, индуцированное компланарной неколлинеарной ДС. Поэтому будем искать собственное решение граничной задачи (2)–(4), асимптотически затухающее вдали от ДС, $\Theta(|x| \to \infty, k_y) = 0$.

Выполнив ряд вычислений, мы получаем точное решение задачи (2)–(4) для связанного состояния:

$$\Theta(x, k_y) = {} = \Theta_0\begin{pmatrix}\gamma \\ 1\end{pmatrix}[h(x)\exp(-p_r x) + h(-x)\exp(p_l x)], \quad (5)$$

$$E_1(k_y) = v\left[k_0\cos\left(\frac{\theta_r - \theta_l}{2}\right) + k_y\sin\left(\frac{\theta_r + \theta_i}{2}\right)\right]. \quad (6)$$

где $\gamma = -\tan\left(\frac{\theta_r+\theta_l}{4}\right)$, если $0 < \theta_r - \theta_l < 2\pi$ $(\sin\left(\frac{\theta_r-\theta_l}{2}\right) > 0)$, и $\gamma = \cot\left(\frac{\theta_r+\theta_l}{4}\right)$, если $0 < \theta_l - \theta_r < 2\pi$ $(\sin\left(\frac{\theta_r-\theta_l}{2}\right) < 0)$, импульсы $p_{r,l}(k_y) = \sqrt{k_0^2 + k_y^2 + 2k_y k_0\sin\theta_{r,l} - (E_1(k_y)/v)^2}$ определяют локализацию состояния в окрестности ДС, $k_0 = \frac{JM_0}{v}$, Θ_0 – нормировочная константа. Ход линейной зависимости энергии 1D поверхностного возбуждения от импульса $E_1(k_y)$ (6) ограничен в зоне Бриллюэна интервалом (k_r, k_l), где

$$k_{r,l} = \mp k_0\frac{\sin\left(\frac{\theta_r-\theta_l}{2}\right)}{\cos\left(\frac{\theta_r+\theta_l}{2}\right)}. \quad (7)$$

Прямая $E_l(k_y)$ соединяет в точках k_r и k_l проекции 2D зон $E^{(\pm)}_{2r,l}(k_y) = \pm v\sqrt{k_y^2 + 2k_0k_y\sin\theta_{r,l} + k_0^2}$, происходящих от правого и левого доменов, соответственно. Иными словами, за пределами интервала (k_r, k_l) связанное состояние (5)–(6) не существует, так как не выполняется условие $p_{r,l} > 0$. Заметим, что $k_r = -k_l$. Подчеркнем, что фермионное возбуждение распространяется вдоль ДС со скоростью $v_* = v\sin\left(\frac{\theta_r+\theta_l}{2}\right)$, величина и знак которой определяются параметрами текстуры.

Если мы рассмотрим отвечающую состоянию (5), (6) спиновую плотность $\mathbf{s}(x, k_y) = \Theta^+(x, k_y)\boldsymbol{\sigma}\Theta(x, k_y)$, то получим соотношения $(\mathbf{s}\cdot(\mathbf{m}_r - \mathbf{m}_l)) = 0$ и $(\mathbf{s}\cdot\mathbf{k}_y) = 0$. То есть, индуцированное на ДС состояние обладает специфической киральностью, когда направление его спиновой поляризации, разница намагниченностей в правом и левом доменах и ориентация ДС взаимно ортогональны друг другу.

Зная спектр 1D связанного состояния, получаем соответствующую плотность состояний

$$N_1(E) = \frac{a}{4\pi|v_*|}|\mathrm{sgn}(E_r - E) + \mathrm{sgn}(E - E_l)|, \quad (8)$$

где a – постоянная кристаллической решетки материала на поверхности и $E_{r,l} = vk_0\frac{\cos(\theta_{r,l})}{\cos\left(\frac{\theta_r+\theta_l}{2}\right)}$. Локальная плотность и компоненты локальной спиновой плотности 1D связанного состояния, $N_1(x,E)$ и $\mathbf{S}_1(x,E) = \sum_{k_y}\mathbf{s}(x,E)\delta(E - E_1(k_y))$, равны, соответственно:

$$N_1(x,E) = \frac{2N_1(E)p_r(E)p_l(E)}{k_0\left|\sin\left(\frac{\theta_r-\theta_l}{2}\right)\right|}\times$$

$$\times\,[h(x)\exp(-2p_r(E)x) + h(-x)\exp(2p_l(E)x)], \quad (9)$$

$$S_1^x(x,E) = \frac{2\gamma}{1+\gamma^2}N_1(x,E),$$

$$S_1^z(x,E) = \frac{1-\gamma^2}{1+\gamma^2}N_1(x,E), \quad (10)$$

$$S_1^y(x,E) = 0,$$

где $p_{r,l}(E) = \left|\cot\left(\frac{\theta_r+\theta_l}{2}\right)\right|\frac{|E-E_{r,l}|}{v}$.

Известно, что на пространственной границе между топологически различными фазами присутствует фермионное состояние, спектральная ветвь которого связывает зону проводимости с валентной зоной [34]. Такое состояние принято называть топологически *нетривиальным* в том смысле, что оно не может исчезнуть при непрерывной деформации гамильтониана системы, не меняющей знак энергетической щели. В рассматриваемой проблеме нетривиальное состояние возникает на неколлинеарной ДС, если нормальные компоненты намагниченности доменов имеют противоположные знаки, $\cos\theta_r\cos\theta_l < 0$. В ином случае, когда знаки нормальной компоненты намагниченности в доменах совпадают, $\cos\theta_r\cos\theta_l > 0$, на ДС возникает *тривиальное* состояние, спектральная ветвь которого замыкается либо между 2D валентными зонами, либо между 2D зонами проводимости. Мы будем использовать термин *тривиальное/нетривиальное состояние*, чтобы различать типы 1D связанного состояния. В работе [35] аналогичным образом классифицировались краевые фермионные состояния в модели 2D изолятора Черна.

На рисунке 1 представлена диаграмма, показывающая области существования различных локализованных решений задачи (2)–(4) на плоскости (θ_r, θ_l),

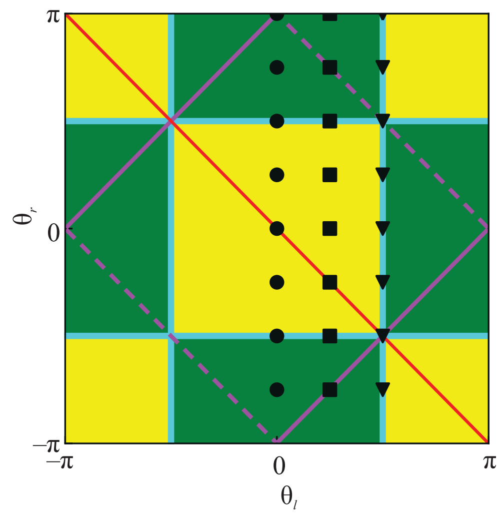

Рис. 1. (Цветной онлайн) Диаграмма, показывающая области существования различных 1D связанных состояний, возникающих на неколлинеарной ДС с параметрами θ_r и θ_l

ограниченной квадратом $-\pi \le \theta_{r,l} \le \pi$. На диагонали $\theta_r = \theta_l$, отвечающей однодоменному случаю, связанного состояния, естественно, нет. Любое отклонение от условия $\theta_r = \theta_l$, ассоциирующееся с появлением ДС, влечет возникновение связанного состояния того или иного типа. Вдоль как горизонтальных $\theta_l = \pm\pi/2$, так и вертикальных прямых $\theta_r = \pm\pi/2$ (показанных синим на рис. 1) один из двух доменов поляризован строго в плоскости поверхности, и поэтому несет 2D состояние с бесщелевым конусом. Таким образом, прямые $\theta_{r,l} = \pm\pi/2$ являются границами между областями неколлинеарных текстур, отличающихся тем, что одни из них порождают тривиальные 1D состояния (показаны желтым), другие – нетривиальные 1D состояния (показаны зеленым). Частным случаем последних являются состояния, поддерживаемые антифазными ДС [33], которые определяются соотношением $|\theta_r - \theta_l| = \pi$ (непрерывные малиновые линии). Здесь же можно выделить две особые точки $\theta_r = -\theta_l = \pi/2$ и $\theta_r = -\theta_l = -\pi/2$, отвечающие планарным антифазным ДС с намагниченностью, строго лежащей в плоскости поверхности по принципу "хвост к хвосту" и "лицо к лицу", соответственно. Планарные ДС порождают 1D связанные состояния с абсолютно плоскими зонами при нулевой энергии $E_1(k_y) = 0$ в интервале $|k_y| < k_0$ и спиновой поляризацией вдоль оси $\mathbf{e}_z$ [33]. Существование таких состояний обусловлено киральной симметрией [36], которой рассматриваемая модель обладает в точках $\theta_r = -\theta_i = \pm\pi/2$. Следуя аргументам, представленным в [35], можно сказать, что возникновение тривиального 1D состояния в интервале $|k_y| < |k_{r,l}|$ поддерживается тем, что модель приближенно удовлетворяет условию киральной симметрии.

Чтобы визуализировать спектральные свойства, мы использовали метод сильной связи. Вычисления в рамках этого метода (детали можно найти в [29]) приводят к результатам, которые находятся в согласии с результатами, полученными методом огибающей волновой функции. Спектры состояний на поверхности собственного АФМ ТИ, содержащей неколлинеарную ДС, представлены на рис. 2–4 в терминах спектральной функции с импульсным разрешением. Изображены зависимости $E_1(k_y)$ и $E^{(\pm)}_{2r,l}(k_y)$, которые соответствуют ДС с различными параметрами (θ_r, θ_l), обозначенными на рис. 1 жирными точками (что связаны с панелями на рис. 2), квадратиками (рис. 3) и треугольниками (рис. 4). Рисунки 2–4 показывают, что ориентация намагниченности доменов определяет зонную структуру 2D состояний, в частности, обменную щель $2vk_0\cos(\theta_{r,l})$, обменное смещение в ЗБ $-k_0\sin(\theta_{r,l})$ и эффективную массу на краях 2D зон $m^*_{r,l} = \frac{k_0\cos(\theta_{r,l})}{v}$. На фоне 2D зон присутствуют ветви тривиальных или нетривиальных 1D состояний. Диапазон существования в импульсном пространстве (k_r, k_l), величина и знак скорости v_* 1D состояний зависят от параметров ДС. Как видно на рис. 2 и 3, спектральная ветвь 1D тривиального состояния полностью лежит внутри 2D зонного континуума и не заходит в запрещенную зону, с другой стороны, ветвь 1D нетривиального состояния пересекает запрещенную зону и частично накладывается на 2D зонный континуум. Текстуры с одинаковыми продольными и противоположными по знаку нормальными компонентами намагниченности в доменах, т.е. $\theta_r + \theta_l = \pm\pi$ (малиновые пунктирные линии на рис. 1), порождают нетривиальные состояния с "легкими фермионами". Примеры спектров таких состояний представлены на рис. 2 (панель с $\theta_r = 0$, $\theta_l = \pi$) и рис. 3 (панель с $\theta_r = \frac{\pi}{4}$, $\theta_l = \frac{3\pi}{4}$). Текстуры с одинаковыми нормальными и противоположными по знаку продольными компонентами намагниченности в доменах, т.е. $\theta_r + \theta_l = 0$ (красная диагональ на рис. 1) индуцируют 1D тривиальные состояния с "тяжелыми фермионами". Эти состояния имеют нулевую скорость $v_* = 0$ и спектр в виде плоской зоны $E_1(k_y) = vk_0\cos(\theta_r)h(|k_0\sin(\theta_r)| - |k_y|)$, соединяющей края верхних или нижних зон 2D состояний, как показано, например, на рис. 3 (панель с $\theta_r = \frac{\pi}{4}$, $\theta_l = -\frac{\pi}{4}$). Плотность состояний для "тяжелых фермионов" принимает вид резкого пика $N_1(E) = \frac{ak_0}{\pi}|\sin(\theta_r)|\delta(E - vk_0\cos(\theta_r))$. На рисунке 4 представлены спектры, характерные для текстур, которые содержат по крайней мере один домен, строго поляризованный в плоскости поверхности. Такая ДС порождает 1D состояние промежуточного типа между тривиальным и нетривиальным, энергетическая ветвь которого берет начало в точке Дирака 2D состояния с бесщелевым конусом, $E_1(k_y) = v\sin\left(\frac{\theta_l}{2} + \frac{\pi}{4}\right)(k_0 + k_y)h(k_0 - |k_y|)$ при $\theta_r = \pi/2$.

Заключение и обсуждение. Мы показали, что изменение в распределении намагниченности существенно модифицирует поверхностную электронную структуру АФМ ТИ. На примере класса жестких неколлинеарных ДС описано поведение поверхностных состояний при вариации текстуры намагниченности. Установлено, что помимо модуляции поверхностной обменной щели и смещения 2D дираковского конуса в обратном пространстве имеется особая спектральная ветвь, связанная с присутствием 1D кирального состояния. Такое состояние является топологическим: оно всегда возникает на локальной неоднородности намагниченности в форме ориентационной ДС. Главные черты связанного состояния, индуцированного ДС, такие как скорость распространения, спиновая поляризация и диапазон существования в импульсном пространстве, зависят от ориентации намагниченностей в доменах относительно друг друга и относительно нормали к поверхности. В свете полученных результатов обсудим несколько важных аспектов.

1. Один из аспектов состоит в том, как экспериментальным путем найти предсказанные состояния поверхностных электронов и установить их связь с магнитными текстурами. Естественно использовать сканирующую туннельную спектроскопию (СТС), если исследуемые образцы АФМ ТИ имеют высокое качество. Согласно предложенной модели, в СТС измерениях в окрестности ДС должна проявляться полоса шириной порядка $\sim p^{-1}_{r,l}(E)$ с повышенной локальной плотностью состояний $N_1(x, E)$ (9), окруженная областью со сравнительно низкой и слабо меняющейся локальной плотностью состояний $N_2(x, E)$, характерной для магнитных доменов. Кроме того, использование магнитного туннельного микроскопа позволило бы определить пространственное распределение спиновой плотности $\mathbf{S}_1(x, E)$ (10). В спектроскопическом эксперименте сигнал считывается одновременно от множества различных магнитных доменов на поверхности образца, каждый из которых дает свой статистический вклад в спектр в соответствии с ориентацией намагниченности в нем. Однако в случае АФМ ТИ такая картина является неполной, так как не принимает во внимание вклад

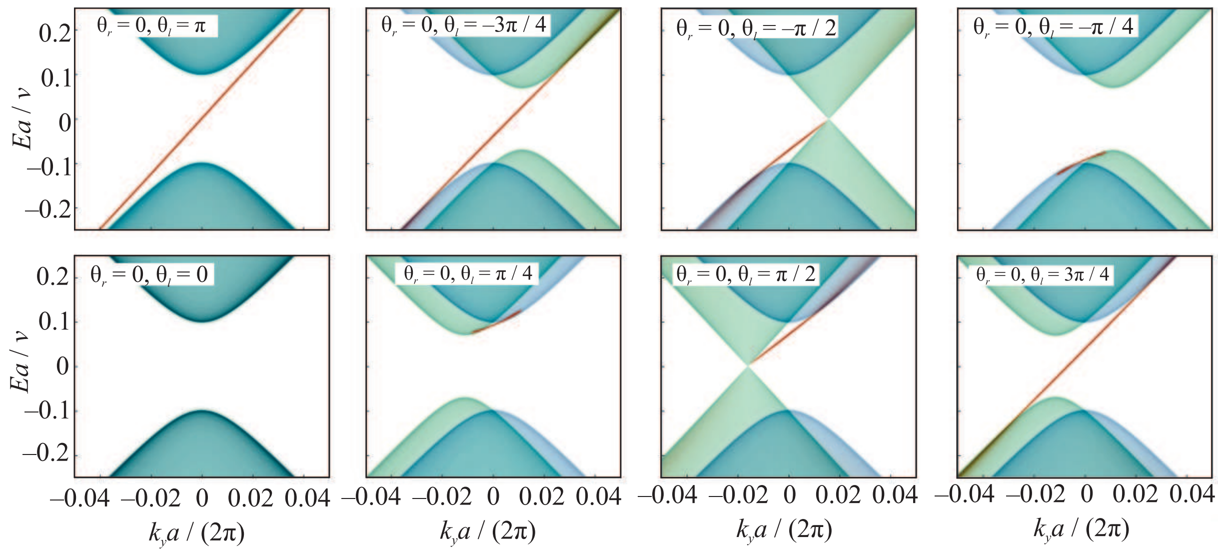

Рис. 2. (Цветной онлайн) Спектральное поведение электронного состояния, индуцированного неколлинеарной ДС на поверхности АФМ ТИ. Представлена последовательность энергетических спектров с изменением одного из параметров ДС θ_l с шагом $\pi/4$ при фиксированном значении другого параметра $\theta_r = 0$. Красной линией показана зависимость $E_1(k_y)$ для 1D связанного состояния, синяя и зеленая кривые изображают проекции дисперсии 2D состояний $E_{2r}^{(\pm)}(k_y) = \pm v\sqrt{k_y^2 + 2k_0 k_y \sin\theta_r + k_0^2}$ и $E_{2l}^{(\pm)}(k_y) = \pm v\sqrt{k_y^2 + 2k_0 k_y \sin\theta_l + k_0^2}$ для правого и левого доменов, соответственно. Зависимости получены в рамках приближения сильной связи. Для безразмерного параметра $k_0 a$ мы использовали значение 0.1

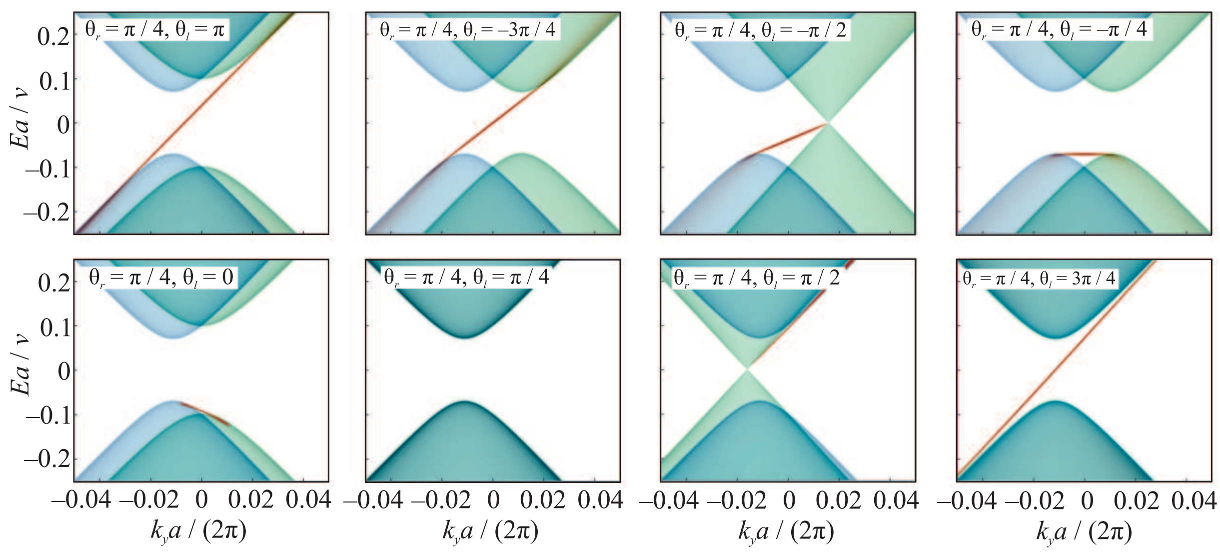

Рис. 3. (Цветной онлайн) То же, что на рис. 2, для $\theta_r = \pi/4$

1D электронных состояний, порожденных границами между доменами. Эти состояния вносят специфический вклад в поверхностный спектр главным образом в пределах обменной щели. Поэтому при высокой концентрации магнитных ДС на поверхности АФМ ТИ обменная щель плотно заполняется индуцированными связанными состояниями. Как следствие, щель либо значительно редуцируется, либо вовсе исчезает, что, по-видимому, наблюдается в ряде ARPES экспериментов на $MnBi_2Te_4$ [24–28]. В транспортных измерениях косвенным признаком возникновения 1D электронных состояний на ДС на поверхности АФМ ТИ может служить наблюдение отрицательного магнитосопротивления в процессе перемаг-

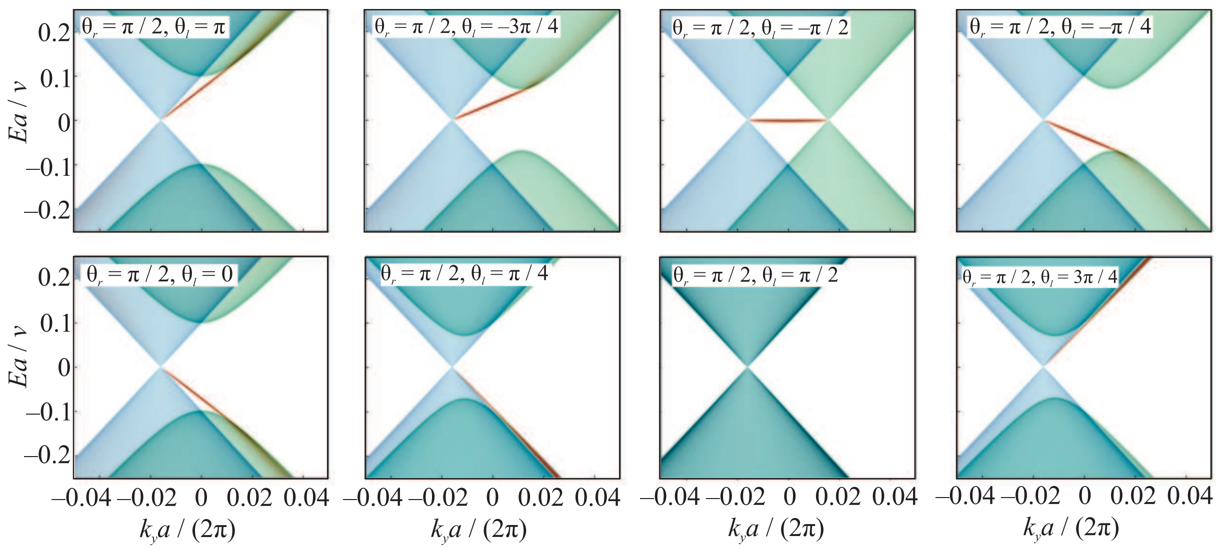

Рис. 4. (Цветной онлайн) То же, что на рис. 2, для $\theta_r = \pi/2$

ничивания образца, когда плотность ДС резко возрастает [37].

2. В работах [29, 30], используя магнитную силовую микроскопию, авторы визуализировали распределение намагниченности на поверхности 3D монокристаллов $MnBi_2Te_4$ и $Mn(Bi,Sb)_2Te_4$ и обнаружили антифазные ДС, которые разделяют домены с противоположной намагниченностью и с типичным размером порядка 10 мкм. С изменением величины перпендикулярного к поверхности магнитного поля наблюдался ряд поверхностных спин-флоп переходов, связанных с формированием сложных текстур в виде неколлинеарных ДС [29]. Мы показали, что на таких ДС должна возникнуть аккумуляция зарядовой и спиновой плотностей, $\sim N_1(x,E)$ и $\sim \mathbf{S}_1(x,E)$, распределения которых зависят от параметров текстуры. Таким образом, существование и эволюция 1D состояния на ДС могут быть верифицированы с помощью СТС измерений на образцах $MnBi_2Te_4$ с низкой плотностью ДС, помещенных во внешнее поле.

3. Мы показали, что текстура поверхностной намагниченности с параметрами $\theta_r + \theta_l = 0$ или с параметрами, близкими к данному соотношению, порождает 1D тривиальное состояние с плоской или почти плоской зоной "тяжелых фермионов". Известно [38], что большая плотность состояний на уровне Ферми способствует усилению межэлектронных корреляций. При частичном заполнении узкой зоны 1D состояния это может проявиться в развитии электронных неустойчивостей того или иного типа (например, волна зарядовой плотности, синглетная или триплетная сверхпроводимость) на границе между доменами на поверхности АФМ ТИ, которые сопровождаются перестройкой энергетического спектра. В реальности состояние с "тяжелым фермионом" имеет малую, но конечную дисперсию и не является полностью поляризованным по спину. Поэтому результат конкуренции между различными типами неустойчивостей зависит как от величины плотности состояний на уровне Ферми, так и от ориентации ДС на гексагональной поверхности АФМ ТИ [39]. Поверхность (0001) $MnBi_2Te_4$, изученная в [29], могла бы послужить хорошей базой для реализации коллективных эффектов на ДС. Действительно, в полях $H > 3.5$ Т авторы зафиксировали неколлинеарную структуру намагниченности, соответствующую параметрам $\theta_r + \theta_l = 0$. Также заметим, что база для исследования коллективных эффектов может быть расширена за счет планарных АФМ ТИ, предсказанных в [40]. ДС с антифазной текстурой намагниченности на поверхности планарных АФМ ТИ служит источником 1D кирального состояния с плоской зоной даже в отсутствии внешнего поля. Однако нормальное к поверхности внешнее поле можно использовать для подгонки энергии плоской зоны к положению уровня Ферми.

4. Мы показали возможность манипуляции свойствами 1D связанного состояния через внешнее воздействие на порождающую это состояние магнитную текстуру. Такую возможность можно использовать для настройки бездиссипативных спин-поляризованных каналов проводимости с линейной (или близкой к линейной) дисперсией на основе 1D нетривиальных состояний на поверхности собственного АФМ ТИ, что весьма актуально для разработки приборов на новых принципах спинтроники и топотроники [41].

Настоящая работа выполнена при финансовой поддержке Санкт-Петербургского государственного университета (проект # 73028629), Российского научного фонда (грант # 18-12-00169-п). И. П. Русинов благодарит за финансовую поддержку Министерство образования и науки РФ в рамках госзадания # 0721-2020-0033 в части численных исследований, приведенных в рамках данной работы.

Вычисления были проведены с использованием оборудования Ресурсного центра "Вычислительный центр СПбГУ" (http://cc.spbu.ru) и на суперкомпьютере SKIF-Cyberia Томского государственного университета.

---

1. Y. Tokura, K. Yasuda, and A. Tsukazaki, Magnetic topological insulators, Nat. Rev. Phys. **1**, 126 (2019).
2. V. N. Men'shov, I. A. Shvets, and E. V. Chulkov, JETP Lett. **110**, 771 (2019).
3. C.-Z. Chang, J. Zhang, X. Feng et al. (Collaboration), Science (Washington, DC, U.S.) **340**, 167 (2013).
4. M. Mogi, M. Kawamura, A. Tsukazaki, R. Yoshimi, K. S. Takahashi, M. Kawasaki, and Y. Tokura, Sci. Adv. **3**, eaao1669 (2017).
5. M. M. Otrokov, I. I. Klimovskikh, H. Bentmann et al. (Collaboration), Nature **576**, 416 (2019).
6. E. K. Petrov, I. V. Silkin, T. V. Menshchikova, and E. V. Chulkov, JETP Lett. **109**, 121 (2019).
7. R. S. K. Mong, A. M. Essin, and J. E. Moore, Phys. Rev. B **81**, 245209 (2010).
8. V. N. Men'shov, V. V. Tugushev, S. V. Eremeev, P. M. Echenique, and E. V. Chulkov, Phys. Rev. B **88**, 224401 (2013).
9. M. M. Otrokov, T. V. Menshchikova, I. P. Rusinov, M. G. Vergniory, V. M. Kuznetsov, and E. V. Chulkov, JETP Lett. **105**, 297 (2017).
10. V. Sakhin, E. Kukovitsky, A. Kiiamov, R. Khasanov, Yu. Talanov, and G. Teitel'baum, JETP Lett. **109**, 479 (2019).
11. С. О. Фильнов, Ю. А. Сурнин, А. В. Королева, И. И. Климовских, Д. А. Естюнин, А. Ю. Варыхалов, К. А. Бокай, К. А. Кох, О. Е. Терещенко, В. А. Голяшов, Е. В. Шевченко, А. М. Шикин, ЖЭТФ **156**, 483 (2019).
12. K. He and Q.-K. Xue, SPIN **9**, 1940016 (2019).
13. A. Sekine and K. Nomura, J. Appl. Phys. **129**, 141101 (2021).
14. M. Sato and S. Fujimoto, J. Phys. Soc. Jpn. **85**, 072001 (2016).
15. В. В. Вальков, В. А. Мицкан, А. О. Злотников, М. С. Шустин, Письма в ЖЭТФ **110**, 126 (2019).
16. A. J. Bestwick, E. J. Fox, X. Kou, L. Pan, K. L. Wang, and D. Goldhaber-Gordon, Phys. Rev. Lett. **114**, 187201 (2015).
17. E. D. L. Rienks, S. Wimmer, J. Sánchez-Barriga, O. Caha, P. S. Mandal, J. Růžička, A. Ney, H. Steiner, V. V. Volobuev, H. Groiss, M. Albu, G. Kothleitner, J. Michalička, S. A. Khan, J. Minár, H. Ebert, G. Bauer, F. Freyse, A. Varykhalov, O. Rader, and G. Springholz, Nature **576**, 423 (2019).
18. I. I. Klimovskikh, M. M. Otrokov, D. Estyunin et al. (Collaboration), npj Quantum Mater. **5**, 54 (2020).
19. Y. Deng, Y. Yu, M. Z. Shi, Z. Guo, Z. X. Wang, X. H. Chen, and Y. Zhang, Science **367**, 895 (2020).
20. S. H. Lee, Y. Zhu, Y. Wang et al. (Collaboration), Phys. Rev. Research **1**, 012011 (2019).
21. C. Lei, O. Heinonen, A. H. MacDonald, and R. J. McQueeney, Phys. Rev. Materials **5**, 064201 (2021).
22. S. Yang, X. Xu, Y. Zhu, R. Niu, C. Xu, Y. Peng, X. Cheng, X. Jia, Y. Huang, X. Xu, J. Lu, and Y. Ye, Phys. Rev. X **11**, 011003 (2021).
23. D. Ovchinnikov, X. Huang, Z. Lin et al. (Collaboration), Nano Lett. **21**, 2544 (2021).
24. A. M. Shikin, D. A. Estyunin, N. L. Zaitsev et al. (Collaboration), Phys. Rev. B **104**, 115168 (2021).
25. A. M. Shikin, D. A. Estyunin, I. I. Klimovskikh et al. (Collaboration), Sci. Rep. **10**, 13226 (2020).
26. Y. J. Chen, L. X. Xu, J. H. Li et al. (Collaboration), Phys. Rev. X **9**, 041040 (2019).
27. Y.-J. Hao, P. Liu, Y. Feng et al. (Collaboration), Phys. Rev. X **9**, 041038 (2019).
28. P. Swatek, Y. Wu, L.-L. Wang, K. Lee, B. Schrunk, J. Yan, and A. Kaminski, Phys. Rev. B **101**, 161109 (2020).
29. P. M. Sass, J. Kim, D. Vanderbilt, J. Yan, and W. Wu, Phys. Rev. Lett. **125**, 037201 (2020).
30. P. M. Sass, W. Ge, J. Yan, D. Obeysekera, J. J. Yang, and W. Wu, Nano Lett. **20**, 2609 (2020).
31. P. Wang, J. Ge, J. Li, Y. Liu, Y. Xu, and J. Wang, The Innovation **2**, 100098 (2021).
32. Y. Zhao and Q. Liu, Appl. Phys. Lett. **119**, 060502 (2021).
33. I. P. Rusinov, V. N. Men'shov, and E. V. Chulkov, Phys. Rev. B **104**, 035411 (2021).
34. X. L. Qi and S. C. Zhang, Rev. Mod. Phys. **83**, 1057 (2011).
35. D. R. Candido, M. Kharitonov, J. C. Egues, and E. M. Hankiewicz, Phys. Rev. B **98**, 161111(R) (2018).
36. C.-K. Chiu, J. C. Y. Teo, A. P. Schnyder, and S. Ryu, Rev. Mod. Phys. **88**, 035005 (2016).
37. J. G. Checkelsky, J. Ye, Y. Onose, Y. Iwasa, and Y. Tokura, Nat. Phys. **8**, 729 (2012).

38. J. Mao, S. P. Milovanović, M. Aneelković, X. Lai, Y. Cao, K. Watanabe, T. Taniguchi, L. Covaci, F. M. Peeters, A. K. Geim, Y. Jiang, and E. Y. Andrei, Nature **584**, 215 (2020).
39. L. Fu, Phys. Rev. Lett. **103**, 266801 (2009).
40. E. K. Petrov, V. N. Men'shov, I. P. Rusinov, M. Hoffmann, A. Ernst, M. M. Otrokov, V. K. Dugaev, T. V. Menshchikova, and E. V. Chulkov, Phys. Rev. B **103**, 235142 (2021).
41. N. Varnava, J. H. Wilson, J. H. Pixley, and D. Vanderbilt, Nat. Commun. **12**, 3998 (2021).