

Электронная и спиновая структура топологических поверхностных состояний $MnBi_4Te_7$ и $MnBi_6Te_{10}$ и их модификация приложенным электрическим полем

А. М. Шикин[+1)], *Н. Л. Зайцев*[*], *А. В. Тарасов*[+], *Т. П. Макарова*[+], *Д. А. Глазкова*[+], *Д. А. Естюнин*[+], *И. И. Климовских*[+]

[+] *Санкт-Петербургский государственный университет, 198504 С.-Петербург, Россия*

[*] *Институт физики молекул и кристаллов Уфимского федерального исследовательского центра РАН, 450075 Уфа, Россия*

Поступила в редакцию 16 августа 2022 г.
После переработки 9 сентября 2022 г.
Принята к публикации 10 сентября 2022 г.

Методами теории функционала плотности (ТФП) проведены расчеты электронной и спиновой структуры топологических поверхностных состояний (ТПС) для антиферромагнитных топологических изоляторов $MnBi_4Te_7$ и $MnBi_6Te_{10}$, состоящих из последовательности магнитных семислойных блоков (СБ) $MnBi_2Te_4$, разделенных немагнитными пятислойными блоками (ПБ) Bi_2Te_3. Проанализированы особенности, характерные для систем с различной терминацией поверхности (как СБ, так и ПБ) и проведено сравнение результатов теоретических расчетов с экпериментально измеренными дисперсиями электронных состояний. Показано, что при терминации поверхности магнитным СБ в структуре ТПС в точке Дирака открывается энергетическая запрещенная зона (ЭЗЗ) порядка 35–45 мэВ, подобно $MnBi_2Te_4$. При терминации поверхности немагнитным ПБ структура ТПС уже ближе к виду, характерному для Bi_2Te_3 с различным энергетическим сдвигом точки Дирака и формированием гибридизационных ЭЗЗ в структуре ТПС, обусловленных взаимодействием с нижележащим СБ. Проведены расчеты, показывающие возможность изменения величины ЭЗЗ в точке Дирака при вариации расстояния между блоками на поверхности без принципиального изменения электронной структуры. Приложение электрического поля перпендикулярно поверхности меняет электронную и спиновую структуру ТПС и может модулировать величину ЭЗЗ в точке Дирака в зависимости от напряженности и знака приложенного поля, что может быть использовано для практических приложений.

DOI: 10.31857/S1234567822200083, EDN: koxqib

В последнее время в физике конденсированного состояния значительные усилия исследователей были направлены на интенсивное изучение особенностей электронной и спиновой структуры систем с уникальным сочетанием топологических и магнитных свойств, которые характеризуются новыми нетривиальными квантовыми эффектами, интересными для практических приложений. Одними из наиболее ярких проявлений подобных эффектов являются квантовый аномальный эффект Холла (КАЭХ) и топологический квантовый магнитоэлектрический (МЭ) эффект, которые основаны на квантовании холловской проводимости и МЭ отклика (см., например, статьи [1–5]). Данные топологические эффекты проявляются в яркой степени в системах на основе топологических изоляторов (ТИ), в которых для реализации КАЭХ внутреннее магнитное поле вводится как путем допирования ТИ магнитными примесями (см., например, [6]), так и за счет эффектов магнитного продолжения (магнитной близости) при нанесении магнитного слоя на поверхность немагнитного ТИ (см., например, [7, 8]). При этом в последнее время были также успешно синтезированы собственные магнитно-упорядоченные ТИ, в которых магнитные атомы включены непосредственно в кристаллическую структуру формируемого магнитного ТИ. Это обеспечивает упорядоченное расположение магнитных атомов внутри кристаллической решетки и позволяет существенно повысить концентрацию магнитных атомов и степень их воздействия. Одним из наиболее ярких примеров такого магнитно-упорядоченного ТИ является антиферромагнитный (АФМ) ТИ со стехиометрией $MnBi_2Te_4$, на исследования электронной структуры и магнитных свойств которого в последние годы направлены значительные усилия (см., например, [9–18]). Одно-

1)e-mail: ashikin@inbox.ru

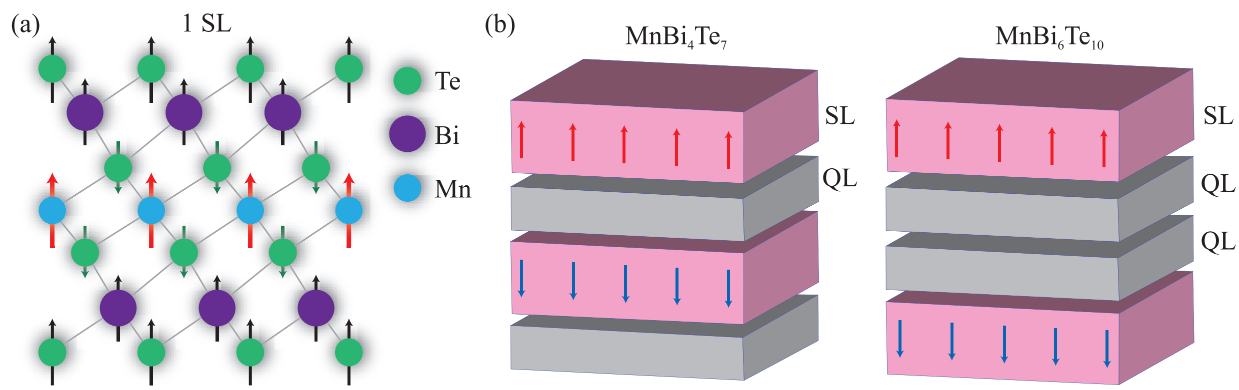

Рис. 1. (Цветной онлайн) (a) – Структура семислойного блока $MnBi_2Te_4$ с расположением атомов и ориентацией магнитных моментов внутри блока. (b) – Изменения общей структуры и ориентация магнитных моментов внутри каждого СБ и между соседними СБ для соединений из данной серии при изменении величины m в стехиометрической формуле для $MnBi_4Te_7$ ($m = 1$) и $MnBi_6Te_{10}$ ($m = 2$). Семислойные и пятислойные блоки обозначены как SL и QL соответственно

временно с этим была показана возможность реализации квантового эффекта Холла в таких системах как теоретически [19, 20], так и экспериментально [21–23], а для тонких слоев $MnBi_2Te_4$ показана возможность реализации КАЭХ при более высоких температурах [21, 24], что существенно повышает прикладной интерес к исследованию электронных и магнитных свойств данного материала. После этого была успешно разработана и синтезирована серия собственных магнитно-упорядоченных АФМ ТИ со стехиометрией $(MnBi_2Te_4)(Bi_2Te_3)_m$ [14, 25–29] с модуляцией магнитных свойств путем введения немагнитных слоев между магнитными СБ. При этом каждое из соединений в данной серии характеризуется как общими, так и уникальными особенностями электронной структуры данных соединений.

Семейство $(MnBi_2Te_4)(Bi_2Te_3)_m$ включает в себя ряд топологически нетривиальных соединений типа $MnBi_2Te_4$ ($m = 0$), $MnBi_4Te_7$ ($m = 1$), $MnBi_6Te_{10}$ ($m = 2$), $MnBi_8Te_{13}$ ($m = 3$) и т.д., которые характеризуются слоистой структурой, состоящей из магнитных СБ со структурой $MnBi_2Te_4$, разделенных слоями немагнитных ПБ со структурой Bi_2Te_3. Все СБ и ПБ разделены Ван-дер-Ваальсовыми (ВдВ) промежутками. При этом соседние магнитные слои связаны АФМ взаимодействием, формируемым между магнитными Mn-слоями. Связь внутри каждого магнитного Mn-слоя имеет ферромагнитный характер. (Для $MnBi_2Te_4$ магнитные СБ связаны напрямую без промежуточных ПБ Bi_2Te_3). На рисунке 1a показана структура СБ $MnBi_2Te_4$ с расположением и ориентацией магнитных моментов внутри блока, а на рис. 1b показаны изменения общей структуры и ориентация магнитных моментов в соседних СБ для соединений из данной серии $MnBi_4Te_7$ ($m = 1$), $MnBi_6Te_{10}$ ($m = 2$), являющихся предметом исследования в данной работе.

На данный момент анализ особенностей электронной и спиновой структуры для соединений из серии $(MnBi_2Te_4)(Bi_2Te_3)_m$ носит ограниченный характер, особенно с представлением и анализом спиновой структуры ТПС в направлениях параллельно и перпендикулярно поверхности, а также изменений их электронной и спиновой структуры ТПС при приложении электрического поля. Именно спиновая структура ТПС и величина ЭЗЗ в точке Дирака и определяет возможность эффективной реализации КАЭХ (в том числе высокотемпературного) в данных соединениях.

Представленная работа в этой связи посвящена изучению особенностей электронной и спиновой структуры соединений $MnBi_4Te_7$ и $MnBi_6Te_{10}$, рассчитанных методом ТФП, для поверхностей с различными терминациями и сравнению результатов теоретических расчетов с экспериментальными спектрами, измеренными методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ФЭСУР). В работе будет проведено сравнение величины ЭЗЗ, открываемой в точке Дирака, оцененной из экспериментальных измерений и теоретических расчетов при вариации параметров расчетов. При этом будет также проведен анализ изменений электронной и спиновой структуры и соответствующей модификации ЭЗЗ в точке Дирака при приложении электрического поля перпендикулярно поверхности (для полей различной напряженности и противоположной направленности), что должно быть интересным для практических применений.

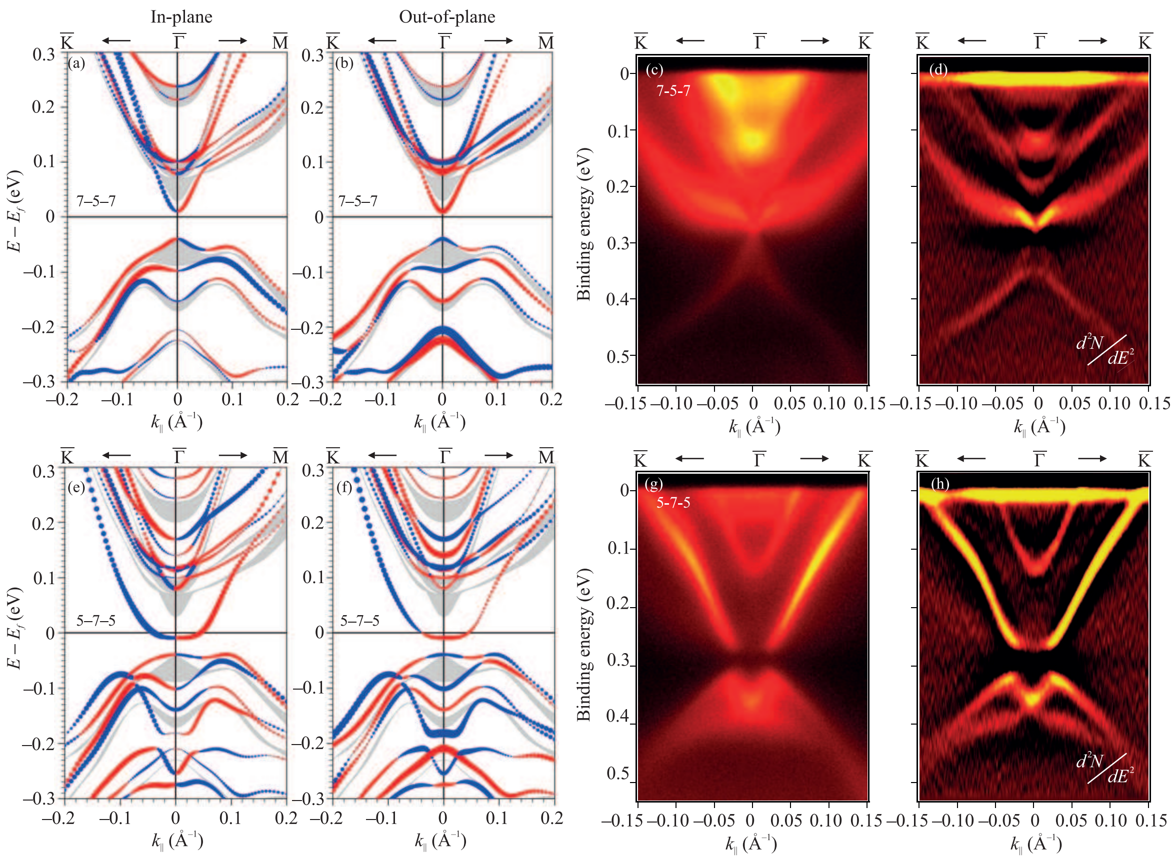

Рис. 2. (Цветной онлайн) (a), (b) и (e), (f) – Рассчитанная электронная и спиновая структура ТПС и ближайших состояний валентной зоны и зоны проводимости для $MnBi_4Te_7$ для терминаций поверхности СБ (7–5–7–5) и ПБ (5–7–5–7). Отдельно показаны дисперсионные зависимости для in-plane (a), (e) и out-of-plane (b), (f) спиновой ориентации. Противоположные направления по $k_{||}$ и $k_{\perp}$ показаны красными и синими символами. (c), (d) и (g), (h) – Соответствующие экспериментально измеренные дисперсионные зависимости, представленные в форме $N(E)$ (c), (g) и d^2N/dE^2 (d), (h)

Анализ особенностей электронной структуры и величины ЭЗЗ, открываемой в точке Дирака, для поверхностей $MnBi_4Te_7$ и $MnBi_6Te_{10}$ с различными терминациями. На рисунках 2 и 3 представлены результаты расчетов электронной и спиновой структуры ТПС и ближайших состояний валентной зоны и зоны проводимости методом ТФП для соединений $MnBi_4Te_7$ и $MnBi_6Te_{10}$ при различной терминации поверхности – магнитным СБ (рис. 2a, b и 3a, b), одним поверхностным ПБ (1 ПБ) (рис. 2e, f и 3e, f) и двумя поверхностными ПБ (2 ПБ) (рис. 3i, j). Представлены расчеты спиновой электронной структуры со спиновой ориентацией как в плоскости поверхности (in-plane), так и перпендикулярно поверхности (out-of-plane). Состояния с противоположной спиновой ориентацией по направлениям $k_{||}$ и $k_{\perp}$ показаны красными и синими символами. Здесь же на рисунках 2c, d и g, h и 3c, d и g, h и k, l для сравнения показаны соответствующие экспериментальные дисперсионные зависимости для данных соединений, измеренные методом ФЭСУР при лазерном возбуждении ($h\nu = 6.3$ эВ). Экспериментальные дисперсионные зависимости, измеренные для случаев соответствующей поверхностной терминации (СБ, 1 ПБ или 2 ПБ), представлены в форме $N(E)$ рис. 2c, g, рис. 3c, g, k и d^2N/dE^2 рис. 2d, h, рис. 3d, h, l. Детали проведенных расчетов приведены в разделе "Методы".

Представленные результаты свидетельствуют о том, что электронная структура ТПС для магнитных ТИ $MnBi_4Te_7$ и $MnBi_6Te_{10}$ существенно различается, в первую очередь, для различных поверхностных терминаций, когда на поверхность выходит либо магнитный СБ со структурой $MnBi_2Te_4$, либо немагнитный ПБ со структурой Bi_2Te_3. При этом для терминаций с одним или двумя ПБ на поверхности наблюдается существенное различие в энергиях связи для точки Дирака, а также более сложная электронная структура ТПС и состояний валентной зоны и зоны проводимости. Результаты представленных рас-

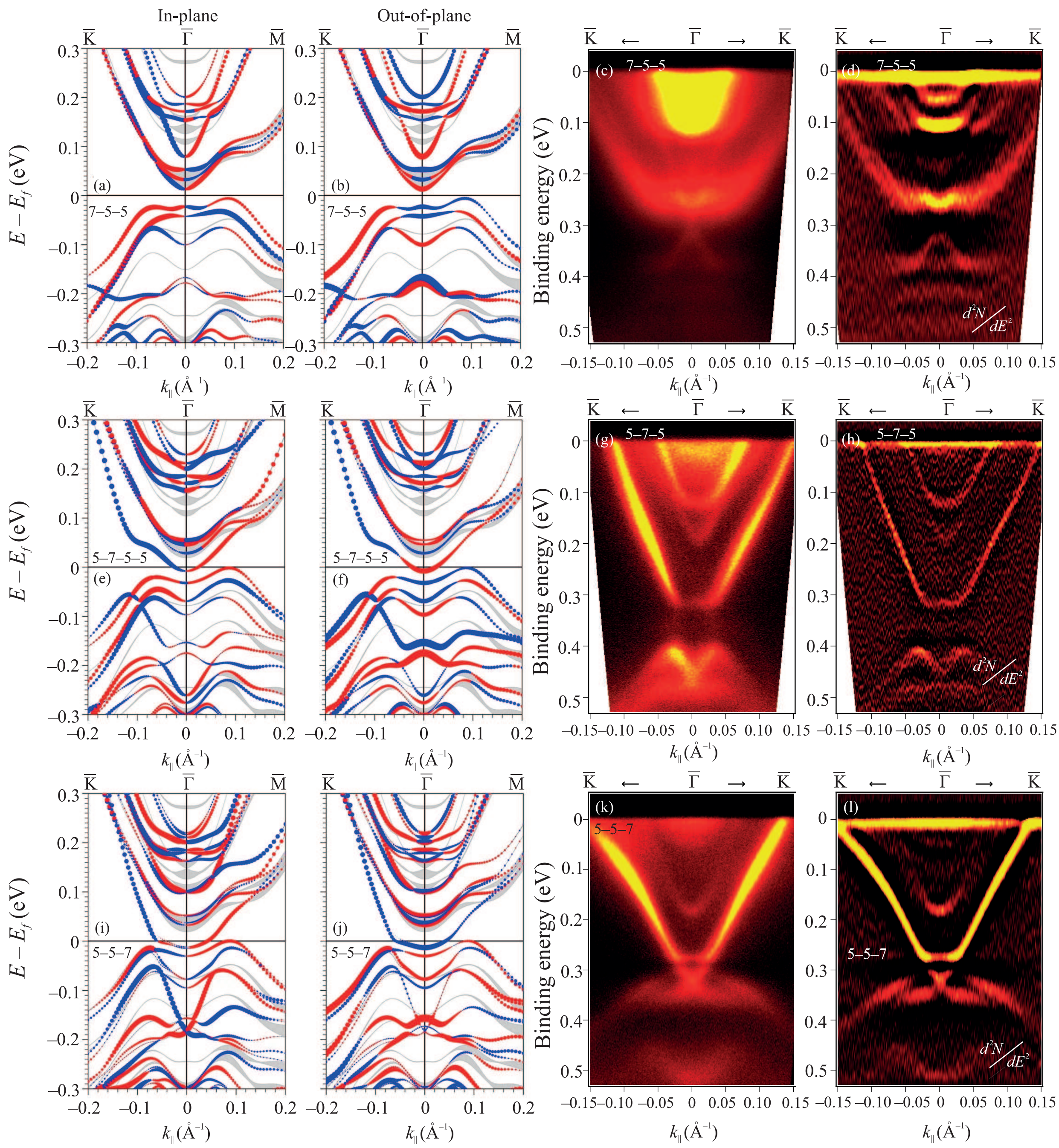

Рис. 3. (Цветной онлайн) (a), (b) и (e), (f) и (i), (j) – Рассчитанная электронная и спиновая структура ТПС и ближайших состояний валентной зоны и зоны проводимости для $MnBi_6Te_{10}$ для поверхности, терминированной СБ (7–5–5–7), одним ПБ (5–7–5–5) и двумя ПБ (5–5–7–5). Отдельно показаны дисперсионные зависимости для in-plane (a), (e), (i)) и out-of-plane (b), (f), (j) спиновой ориентации. Противоположные направления по $k_{||}$ и $k_{\perp}$ показаны красными и синими символами. (c), (d) и (g), (h) и (k), (l) – Соответствующие экспериментально измеренные дисперсионные зависимости, представленные в форме $N(E)$ (c), (g), (k) и d^2N/dE^2 (d), (h), (l)

четов электронной структуры в основном коррелируют с данными расчетов, опубликованных в работах [27, 30–37], и подтверждаются в целом экспериментальными данными. В дополнение в данной работе представлены расчеты спиновой структуры данных систем.

Из анализа приведенных теоретических зависимостей электронной и спиновой структуры ТПС видно, что при терминации поверхности магнитным СБ оба типа образцов ($MnBi_4Te_7$ и $MnBi_6Te_{10}$) в области точки $\bar{\Gamma}$ характеризуются геликоидальной in-plane спиновой структурой (аналогично $MnBi_2Te_4$ [9, 18, 38]). При этом в области точки $\bar{\Gamma}$ для терминаций магнитным СБ все представленные спектры характеризуются открытием ЭЗЗ в точке Дирака (при ($k_{||}$=0)). Согласно приведенным расчетам величина ЭЗЗ в точке $\bar{\Gamma}$ для $MnBi_4Te_7$ и $MnBi_6Te_{10}$ должна быть 42 и 36 мэВ соответственно. Это, в частности, коррелирует с данными в работе [35], где величина ЭЗЗ в точке Дирака для $MnBi_6Te_{10}$ также оценивалась теоретически на уровне 35 мэВ. Данная величина ЭЗЗ как для $MnBi_4Te_7$, так и $MnBi_6Te_{10}$ меньше, чем величина Дираковской ЭЗЗ для $MnBi_2Te_4$, которая согласно расчетам должна достигать величины 55–88 мэВ. Уменьшение величины ЭЗЗ может быть обусловлено уменьшением обменного взаимодействия между соседними Mn слоями в соединениях $MnBi_4Te_7$ и $MnBi_6Te_{10}$ по сравнению с $MnBi_2Te_4$. Причем ввиду того, что для $MnBi_6Te_{10}$ между СБ вводится уже 2 немагнитных ПБ (по сравнению с одним ПБ в $MnBi_4Te_7$), формируемая ЭЗЗ в точке Дирака для $MnBi_6Te_{10}$ имеет меньшую величину. Сравнение с экспериментом показывает хорошее согласие как для общей структуры ТПС, так и для состояний валентной зоны и зоны проводимости.

В случае терминации поверхности немагнитными ПБ электронная и спиновая структура имеет более сложный характер. Для ПБ-терминации для $MnBi_4Te_7$, в соответствии с представленными экспериментальными спектрами, точка Дирака сдвигается в сторону более высоких энергий связи. При этом в области верхнего Дираковского конуса формируется дополнительная ЭЗЗ вследствие гибридизации состояний верхнего ПБ с состояниями более низколежащего СБ в области точки Дирака данного СБ [27, 30–37]. Для рассчитанных спектров (в особенности для $MnBi_4Te_7$) также явно видно формирование такой гибридизационной ЭЗЗ. Для $MnBi_6Te_{10}$ дополнительно имеет место сдвиг по энергии для точки, соответствующей нижнему краю верхней части Дираковского конуса, как для рассчитанных, так и для экспериментальных спектров. Для образцов $MnBi_6Te_{10}$ с поверхностной терминацией двумя немагнитными ПБ спектр уже более похож на Дираковский конус, характерный для Bi_2Te_3.

При этом, если сравнивать теоретические и экспериментальные спектры, в экспериментальных спектрах по обеим сторонам Дираковского конуса в зоне проводимости появляются дополнительные состояния. Предполагается, что появление этих состояний обусловлено некоторой гибридизацией состояний Дираковского конуса в верхнем СБ $MnBi_2Te_4$ с объемными состояниями из нижележащего ПБ Bi_2Te_3 [27, 30–37]. Причем эти состояния проявляются более явно при фотоэлектронных (ФЭ) измерениях с использованием лазерного излучения [30–34, 36, 37, 39], которые характеризуются значительно большей глубиной выхода фотоэлектронов, что позволяет чувствовать вклад в ФЭ спектры также второго более низколежащего ПБ. При измерениях с использованием синхротронного излучения с большей энергией возбуждающих фотонов (что соответствует меньшей глубине выхода фотоэлектронов) данные состояния проявляются в значительно меньшей степени [27], несмотря на то, что положение точки Дирака при измерениях с использованием синхротронного и лазерного излучения практически совпадает. Данные гибридизационные эффекты особенно ярко проявляются для случаев поверхностной терминации одним ПБ Bi_2Te_3 путем формирования ярко выраженной гибридизационной ЭЗЗ в области состояний верхнего конуса Дираковских состояний, находящихся в области края валентных состояний у нижележащего СБ. В случае поверхностной терминации двумя ПБ данные гибридизационные эффекты проявляются уже в меньшей степени. Здесь также следует отметить, что существует и другая интерпретация появления дополнительных состояний по обеим сторонам от состояний верхнего Дираковского конуса, обусловленная формированием соответствующих Рашба состояний и их гибридизацией с ТПС (см. [33, 40]).

Сравнение с экспериментально измеренными данными. Для экспериментального анализа величины ЭЗЗ в точке Дирака на рис. 4a–j показаны экспериментальные дисперсии, измеренные методом ФЭСУР для поверхности $MnBi_4Te_7$, терминированной магнитным СБ, для двух различных образцов. Здесь следует отметить, что формирование ЭЗЗ в точке Дирака напрямую связано с инверсией out-of-plane спиновой поляризации между состояниями верхнего и нижнего Дираковского конуса в точке Дирака (см. out-of-plane спиновую структуру на рис. 2 и 3), которая наиболее ярко проявляется именно для СБ-терминированной поверхности. Спектры были измерены с использованием лазерного излучения с энергией фотонов 6.3 эВ при температуре 10 K, что ниже температуры Нееля. На рисунке 4a, b, c и f, g, h представлены дисперсионные зависимости в форме $N(E)$ (a), (f), а также d^2N/dE^2 (b), (g) (для лучшей визуализации ЭЗЗ в точке Дирака

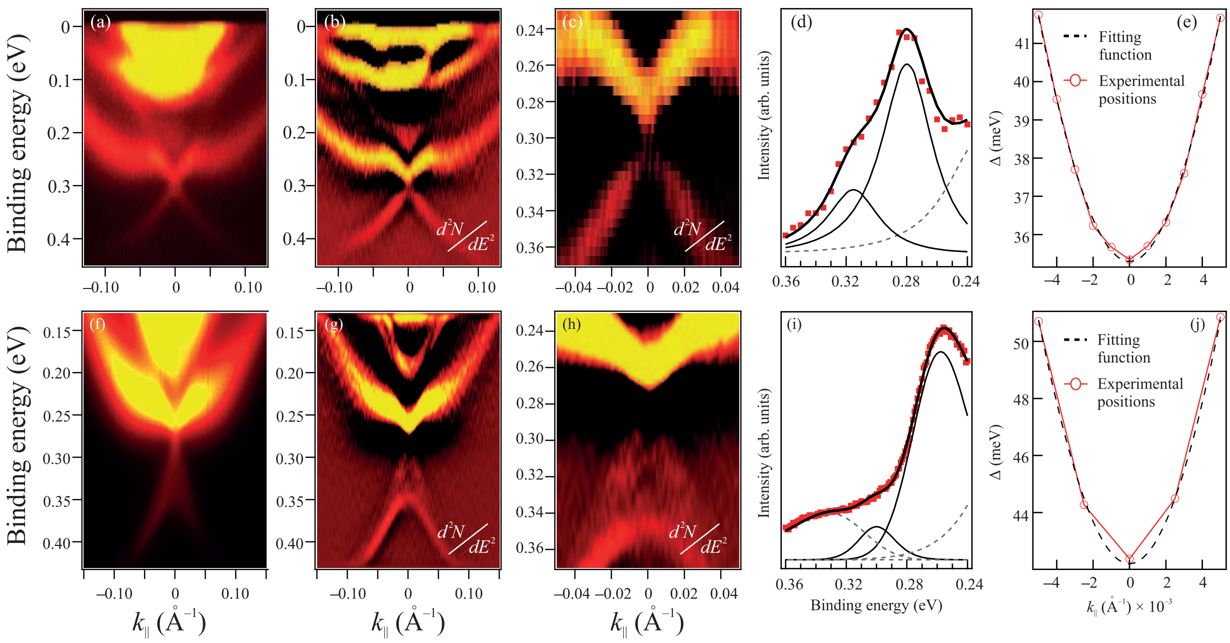

Рис. 4. (Цветной онлайн) Экспериментально измеренные дисперсии электронных состояний для поверхности $MnBi_4Te_7$, терминированной магнитным СБ. Спектры представлены в форме $N(E)$ (a), а также d^2N/dE^2 (b) с дополнительной детализацией в области точки Дирака (c). (d) – Соответствующие распределения плотности электронных состояний, измеренные непосредственно в $\bar{\Gamma}$-точке при $k_{||}$=0, с разложением на спектральные компоненты (черные сплошные линии – состояния конуса Дирака, показывающие величину ЭЗЗ). (e) – Изменения в энергетическом расщеплении между состояниями верхнего и нижнего конуса ТПС при изменении значения $k_{||}$ в положительном и отрицательном направлениях относительно $\bar{\Gamma}$-точки. (f)–(j) – То же самое для другого образца

(при $k_{||} = 0$)) и с дополнительной детализацией в области точки Дирака (c), (h)). На рисунке 4d, i красными символами и черными линиями показаны соответствующие распределения плотности электронных состояний (ПЭС), измеренные непосредственно в $\bar{\Gamma}$-точке. Здесь же черными линиями представлено разложение измеренных ПЭС на спектральные составляющие (компоненты). Энергетические положения данных спектральных компонент соответствуют краям ЭЗЗ, открываемой в точке Дирака. Рисунки 4e, j показывают изменения в энергетическом расстоянии между состояниями верхнего и нижнего конуса ТПС вне $\bar{\Gamma}$-точки (полученные из аналогичных разложений на спектральные составляющие) при изменении значения $k_{||}$ в положительном и отрицательном направлениях относительно $\bar{\Gamma}$-точки. Представленные зависимости аппроксимируются модельной кривой, характерной для Дираковского конуса с ЭЗЗ: $E \sim (\alpha^2k^2 + \Delta^2)^{1/2}$, где Δ определяет размер ЭЗЗ в точке Дирака. Такой подход позволяет уменьшить ошибку при оценке величины ЭЗЗ. Минимальное энергетическое расщепление в $\bar{\Gamma}$-точке соответствует величине ЭЗЗ в точке Дирака.

Представленные на рис. 4 экспериментальные данные показывают, что поверхностная терминация $MnBi_4Te_7$ магнитным СБ действительно характеризуется наличием ЭЗЗ (порядка 35–42 мэВ), открываемой в точке Дирака. Причем экспериментально измеренная величина ЭЗЗ в точке Дирака коррелирует с величиной ЭЗЗ, полученной из теоретических расчетов (порядка 42 мэВ). Анализ того, как может изменяться величина ЭЗЗ при возможной вариации ВдВ расстояния между СБ и ПБ, составляющими систему, будет представлен ниже на рис. 5. При этом следует отметить, что в литературе существуют работы, предполагающие как отсутствие ЭЗЗ непосредственно в точке Дирака [32–34], так и наличие ЭЗЗ в точке Дирака для различных ТИ из семейства $(MnBi_2Te_4)(Bi_2Te_3)_m$, что было показано как теоретически [27, 35–37], так и экспериментально [27, 29, 39]. Однако, если проанализировать out-of-plane спиновую структуру для поверхностей, терминированных магнитным СБ на рис. 2, 3, то как для $MnBi_4Te_7$, так и для $MnBi_6Te_{10}$ данная спиновая структура характеризуются ярко выраженной инверсией спиновой поляризации по краям Дираковской ЭЗЗ непосред-

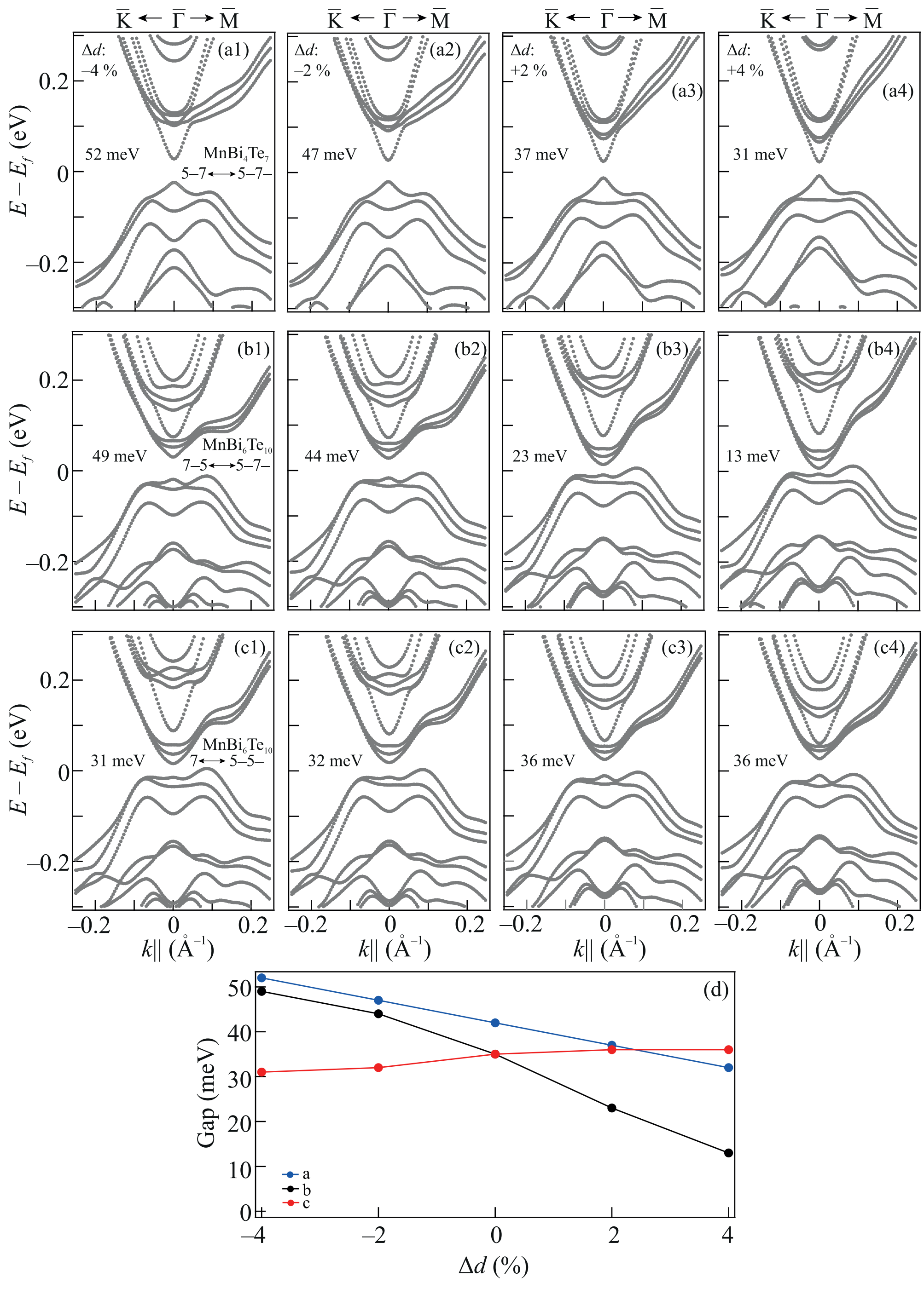

Рис. 5. (Цветной онлайн) (a1–a4) – Изменение электронной структуры при вариации ВдВ расстояния между СБ и ПБ для поверхности $MnBi_4Te_7$, терминированной магнитным СБ. (b1-b4) и (c1-c4) – То же самое для $MnBi_6Te_{10}$ при вариации расстояния между ПБ, а также ПБ и СБ соответственно. (d) – Соответствующие изменения величины ЭЗЗ в точке Дирака для всех трех рассчитанных вариантов

ственно в точке $\bar{\Gamma}$. Подобная out-of-plane спиновая поляризация обусловлена появлением массового члена в Гамильтониане и формированием ЭЗЗ в точке Дирака. Для терминации поверхности немагнитным ПБ выделить out-of-plane спиновую поляризацию между верхним и нижним конусом в области точки Дирака значительно труднее ввиду сильного перекрытия с ветвями состояний валентной зоны.

Зависимость особенностей электронной структуры от параметров расчетов. Следует отметить, что в расчетах, представленных в литературе, в различных работах используются различные величины как ВдВ расстояний между СБ и ПБ, так и внутрислойных межатомных расстояний. В литературе существует определенный разброс в значениях используемых параметров, что обуславливает возможные небольшие различия в особенностях рассчитанных электронных спектров, включая различие в величине ЭЗЗ в точке Дирака. Представленные на рис. 2, 3 теоретические дисперсионные зависимости были рассчитаны исходя из атомной структуры элементарной ячейки $MnBi_4Te_7$, используемой в работах [9, 17, 18]. При этом величины ВдВ расстояний между СБ и ПБ выбирались как средние значения между значениями, используемыми в работах [25, 27]. Для выяснения вопроса о том, как выбор величин ВдВ интервалов может влиять на детали электронной структуры и величину ЭЗЗ в точке Дирака в данной работе были проведены дополнительные сравнительные расчеты с использованием структурных параметров для СБ, как в [41], с дополнительной вариацией ВдВ интервала между ПБ и СБ как в сторону его увеличения, так и уменьшения.

На рисунке 5a1–a4 представлены расчеты изменений электронной структуры для $MnBi_4Te_7$ с поверхностью, терминированной магнитным СБ, и величины ЭЗЗ в точке Дирака при вариации ВдВ интервала между СБ и ПБ по всему объему образца относительно исходного ВдВ интервала 2.726 Å. Данное значение было взято как среднее между значениями ВдВ расстояний, используемых в работах [25, 27]. Параметры структруры СБ были взяты из работы [41]. На рисунке 5b1–b4 и c1–c4 показаны аналогичные изменения электронной структуры для поверхности $MnBi_6Te_{10}$, также терминированной магнитным СБ, при вариации ВдВ интервала между ПБ, а также между ПБ и СБ соответственно. Результирующие изменения величины ЭЗЗ в точке Дирака при вариации ВдВ расстояний для всех трех рассчитанных вариантов показаны на рис. 5d.

Представленные результаты показывают, что при вариации ВдВ интервала для $MnBi_4Te_7$ в пределах ± 4 % величина ЭЗЗ в точке Дирака может изменяться в пределах от 52 до 31 мэВ. Аналогичные оценки для $MnBi_6Te_{10}$ показывают возможные изменения величины ЭЗЗ в точке Дирака в пределах от 49 до 13 мэВ или от 31 до 36 мэВ при вариации расстояния между ПБ, а также ПБ и СБ соответственно. Если брать все изменения ВдВ в пределах ±2 %, то общие изменения в величине ЭЗЗ в точке Дирака находятся в пределах от 23 до 47 мэВ. Если сравнивать с работами [25, 27], то различия в отмеченных параметрах не превышают ±(2–4) %. Это ведет к возможному изменению величины ЭЗЗ в точке Дирака в основном в пределах от 30 до 50 мэВ, что укладывается в диапазон изменения экспериментально измеренных величин ЭЗЗ в точке Дирака, представленных в данной и других работах. При этом существенных изменений в электронной структуре для данных соединений не наблюдается.

Из проведенного сравнения и анализа можно сделать вывод, что представленные на рис. 2 и 3 рассчитанные зависимости электронной и спиновой структуры для различных поверхностных терминаций для $MnBi_4Te_7$ и $MnBi_6Te_{10}$ и их принципиальные особенности не определяются в значительной степени вариацией ВдВ расстояний и коррелируют с данными в литературе.

Изменение электронной структуры $MnBi_4Te_7$ и $MnBi_6Te_{10}$ при приложении электрического поля. В рамках работы дополнительно была исследована возможность изменения ЭЗЗ при изменении внешних факторов исследуемых образцов. На рис. 6a1–a8 и b1–b8 представлены соответственно результаты расчетов электронной и спиновой структуры ТПС для поверхности $MnBi_4Te_7$ и $MnBi_6Te_{10}$, терминированной магнитным СБ при приложении электрического поля различной напряженности и противоположной направленности (от +0.11 В/Å до −0.34 В/Å), приложенного по нормали к поверхности. Показаны вклады состояний, локализованных, в основном, в области первого поверхностного СБ. Левые и правые панели на каждом вкладыше показывают спиновую структуру топологических состояний со спиновой ориентацией вдоль поверхности (in-plane) и перпендикулярно поверхности (out-of-plane) соответственно. Противоположные направления спиновой компоненты (S_x и $-S_x$) и (S_z и $-S_z$) для ориентации вдоль и перпендикулярно поверхности показаны красными и синими цветами соответственно.

Представленные спектры показывают, что при приложении электрического поля топологические состояния Дираковского конуса смещаются по энергии относительно состояний валентной зоны и зоны проводимости (как для $MnBi_4Te_7$, так и $MnBi_6Te_{10}$) различным образом в зависимости от знака и напряженности приложенного поля. При этом величина ЭЗЗ в точке Дирака также изменяется. При приложении поля “отрицательной” направленности величина ЭЗЗ уменьшается, и при напряженности при-

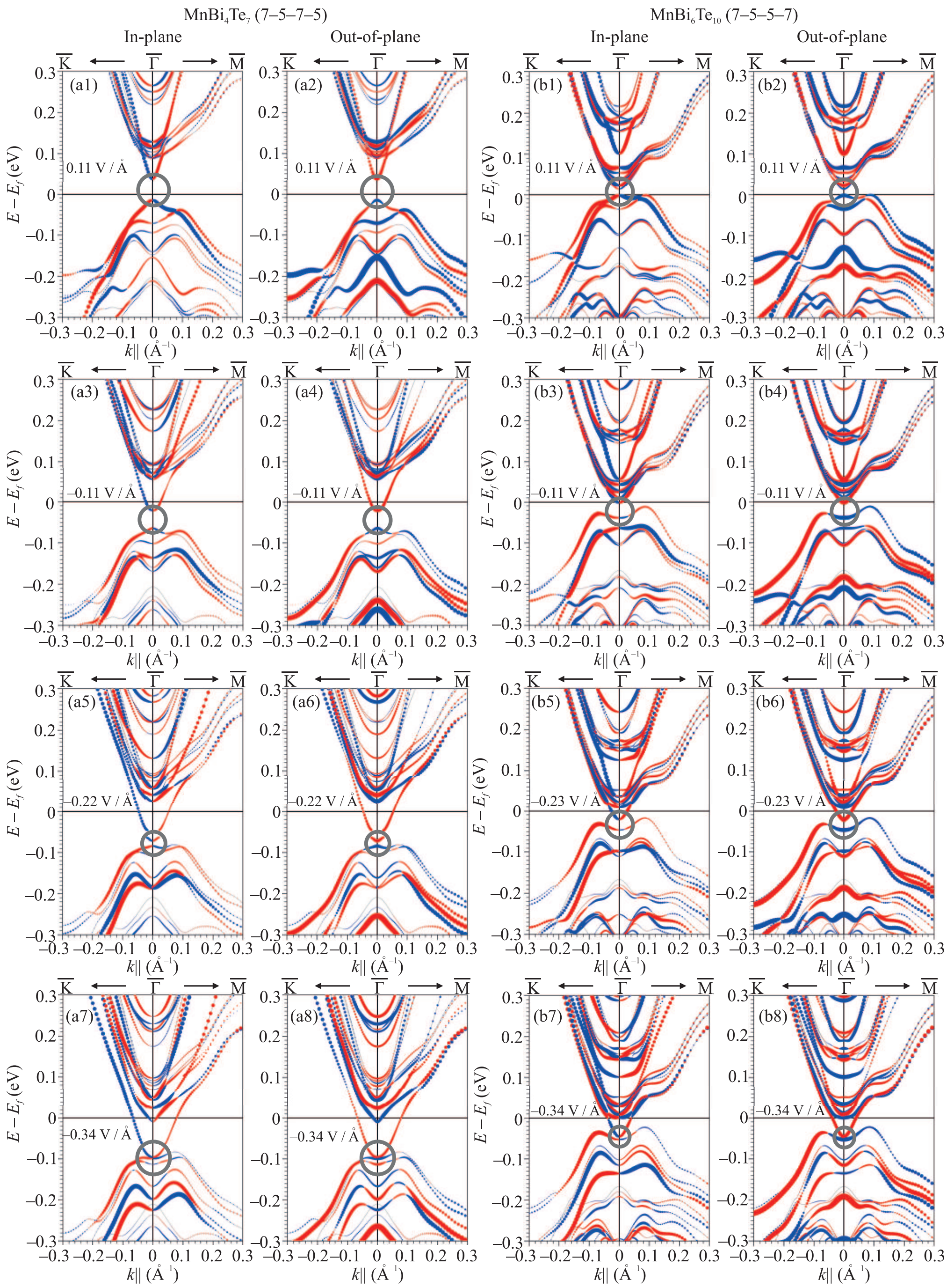

Рис. 6. (Цветной онлайн) Изменения электронной и спиновой структуры с in-plane и out-of-plane спиновой ориентацией для поверхностей $MnBi_4Te_7$ (a1–a8) и $MnBi_6Te_{10}$ (b1–b8), терминированных магнитным СБ, при приложении электрического поля по нормали к поверхности различной направленности и напряженности (от $+0.11$ В/Å до -0.34 В/Å). Кружки показывают локализацию точки Дирака и изменение величины ЭЗЗ в точке Дирака при вариации приложенного электрического поля

ложенного электрического поля -0.34 В/Å величина ЭЗЗ уменьшается практически до нуля как для $MnBi_4Te_7$, так и $MnBi_6Te_{10}$. Положение точки Дирака и соответствующей ЭЗЗ показано кружками для лучшей визуализации. Подобные тенденции в изменении величины ЭЗЗ в точке Дирака при приложении электрического поля наблюдались также для $MnBi_2Te_4$ [18, 38]. Хотя для уменьшения величины

ЭЗЗ практически до нулевых значений в случае поверхности $MnBi_2Te_4$ требовалась более высокая напряженность приложенного электрического поля.

Следует отметить, что при всех изменениях приложенного электрического поля геликоидальный характер in-plane спиновой структуры (т.е. противоположные направления спинов для противоположных $k_{||}$-направлений вблизи точки $\bar{\Gamma}$) сохраняется как для $MnBi_4Te_7$, так и $MnBi_6Te_{10}$. Инверсия out-of-plane спиновой структуры по краям ЭЗЗ в точке Дирака также сохраняется для всех напряженностей приложенного электрического поля вплоть до почти нулевых значений ЭЗЗ. Данное наблюдение позволяет сделать предположение о возможности целенаправленного изменения физико-химических свойств АФМ ТИ $MnBi_4Te_7$ и $MnBi_6Te_{10}$ путем модулирования величины ЭЗЗ в точке Дирака за счет приложения внешнего электрического поля.

Заключение. В работе представлены расчеты особенностей электронной и спиновой (in-plane и out-of-plane) структуры ТПС и ближайших состояний валентной зоны и зоны проводимости, проведенные методом ТФП для образцов $MnBi_4Te_7$ и $MnBi_6Te_{10}$ с различной терминацией поверхности – магнитным СБ или немагнитными ПБ. Было показано, что для образцов $MnBi_4Te_7$ и $MnBi_6Te_{10}$ с терминацией поверхности магнитным СБ в электронной структуре ТПС в точке Дирака открывается ЭЗЗ, величина которой может быть оценена на уровне 42 мэВ для $MnBi_4Te_7$ и 36 мэВ для $MnBi_6Te_{10}$. Сравнение с результатами экспериментальных исследований, проведенных методом ФЭСУР, показали корреляцию между результатами расчетов и экспериментальными измерениями. Было исследовано влияние вариации величины ВдВ расстояния между слоями на поверхности и было показано, что при вариации поверхностного ВдВ интервала в пределах $\pm 4\,\%$ для обеих систем возможное изменение величины ЭЗЗ в точке Дирака находится в пределах 30–50 мэВ, что коррелирует с экспериментально измеренными значениями. При этом существенных изменений электронной структуры не наблюдается.

Приложение электрического поля перпендикулярно поверхности приводит к различному энергетическому сдвигу конуса Дираковских состояний и состояний валентной зоны и зоны проводимости. При этом приложенное электрическое поле изменяет величину ЭЗЗ в точке Дирака, и при напряженности электрического поля $-0.34\,В/Å$ ЭЗЗ в точке Дирака практически закрывается, что может быть использовано для модуляции магнитных и физико-химических свойств данных магнитных ТИ.

Рассчитанные спектры демонстрируют in-plane геликоидальную спиновую структуру ТПС, инверсную относительно $\pm k_{||}$, и out-of-plane инверсную спиновую структуру относительно краев ЭЗЗ в точке Дирака, что характерно для магнитных ТИ.

Методы. В расчетах исследуемые поверхности представлялись повторяющимися слэбами, составленными из 4 СБ $MnBi_2Te_4$ и 4 ПБ Bi_2Te_3 в случае структуры $MnBi_4Te_7$ и, соответственно, из 4 и 8 блоков в случае $MnBi_6Te_{10}$. Гексагональный параметр решетки a брали равным 4.33 Å, а параметр c подбирался таким образом, чтобы межблочные ВдВ расстояния соответствовали таковым $d_{vdW} = 2.73$ Å для структуры $MnBi_2Te_4$ [18, 38]. Между слэбами помещался вакуумный слой толщиной 12 Å.

Электронную структуру интерфейсов рассчитывали с помощью программы OPENMX [42], в которой реализован полностью релятивистский метод функционала электронной плотности с использованием псевдопотенциала сохраняющего норму [43] и псевдоатомных орбиталей в качестве базисных функций [44–46]. Расчеты проводились в рамках обобщенного градиентного приближения с использованием его PBE версии [47]. Базисные функции задавались следующим образом: Mn6.0-$s3p3d2$, Te7.0-$s3p3d2f1$ и Bi8.0-$s3p3d2f1$. На примере Mn нотация означает, что 3 примитивные орбитали использовались для представления s- и p-орбиталей, и только две – для представления d-орбитали, с радиусом обрезания 6.0 атомных единиц. Сетка интегрирования в прямом пространстве определялась энергией обрезания 200 Ry, а в обратном пространстве, для разбивки поверхностной зоны Бриллюэна, сетка задавалась как 9×9 k-точек. Критерий сходимости по полной энергии $1.4 \cdot 10^{-5}$ эВ. Для корректировки d-состояний марганца использовался метод DFT + U [48] в схеме Дударева [49] с параметром $U = 5$ эВ [18]. Внешний электрический градиент вдоль нормали к поверхности задавался путем размещения дополнительного заряда в области вакуума совместно с граничными условиями "вакуум–слэб–метал" в рамках метода эффективной экранирующей среды [50], во избежание кулоновского взаимодействия между слэбами.

Измерения дисперсионных карт проводились на установке μ-Laser ARPES в центре HiSOR (Хиросима, Япония) при фотовозбуждении лазерным излучением с энергией $h\nu = 6.3$ эВ. Пространственное разрешение составляло около 5 мкм (определяется размером сфокусированного лазерного пятна). Использовался энергоанализатор Scienta R4000, установленный под углом 50° относительно падающего пучка фотонов. Чистые поверхности образцов были получены путем скола в сверхвысоком вакууме. Давление во время всех фотоэмиссионных экспериментов было лучше, чем 1×10^{-11} мбар.

Работа была выполнена в рамках финансовой поддержки Министерством Науки и Высшего образования РФ (грант # 075-15-2020-797 (13.1902.21.0024)).

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.-Z. Chang, J. Zhang, X. Feng et al. (Collaboration), Science **340**, 167 (2013).
4. Y. Tokura, K. Yasuda, and A. Tsukazaki, Nat. Rev. Phys. **1**, 126 (2019).
5. C.-Z. Chang, W. Zhao, D. Y. Kim, H. Zhang, B. A. Assaf, D. Heiman, Sh.-C. Zhang, C. Liu, M. Chan, and J. S. Moodera, Nat. Mater. **14**, 473 (2015).
6. V. N. Men'shov, V. V. Tugushev, and E. V. Chulkov, JETP Lett. **104**, 453 (2016).
7. M. M. Otrokov, T. V. Menshchikova, I. P. Rusinov, M. G. Vergniory, V. M. Kuznetsov, and E. V. Chulkov, JETP Lett. **105**, 297 (2017).
8. E. K. Petrov, I. V. Silkin, T. V. Menshikova, and E. V. Chulkov, JETP Lett. **109**, 121 (2019).
9. M. M. Otrokov, I. I. Klimovskikh, H. Bentmann et al. (Collaboration), Nature **576**, 416 (2019).
10. D. Zhang, M. Shi, T. Zhu, D. Xing, H. Zhang, and J. Wang, Phys. Rev. Lett. **122**, 206401 (2019).
11. J. Li, Y. Li, S. Du, Z. Wang, B.-L. Gu, S.-C. Zhang, K. He, W. Duan, and Y. Xu, Sci. Adv. **15**, eaaw5685 (2019).
12. Y. Gong, J. Guo, J. Liet al. (Collaboration), Chin. Phys. Lett. **36**, 076801 (2019).
13. S. Lee, Y. Zhu, Y. Wang et al (Collaboration), Phys. Rev. Res. **1**, 012011 (2019).
14. Z. S. Aliev, I. R. Amiraslanov, D. I. Nasonova, A. V. Shevelkov, N. A. Abdullayev, Z. A. Jahangirli, E. N. Orujlu, M. M. Otrokov, N. T. Mamedov, M. B. Babanly, and E. V. Chulkov, J. Alloys Compd. **789**, 443 (2019).
15. Y. Hao, P. Liu, Y. Feng et al. (Collaboration), Phys. Rev. X **9**, 041038 (2019).
16. D. A. Estyunin, I. I. Klimovskikh, A. M. Shikin, E. F. Schwier, M. M. Otrokov, A. Kimura, S. Kumar, S. O. Filnov, Z. S. Aliev, M. B. Babanly, and E. V. Chulkov, APL Mater. **8**, 021105 (2020).
17. A. M. Shikin, D. A. Estyunin, I. I. Klimovskikh et al. (Collaboration), Sci. Rep. **10**, 13226 (2020).
18. A. M. Shikin, D. A. Estyunin, N. L. Zaitsev et al. (Collaboration), Phys. Rev. B **104**, 115168 (2021).
19. T. Jungwirth, X. Marti, P. Wadley, and J. Wunderlich, Nat. Nanotechnol. **11**, 231 (2016).
20. L. Smejkal, Y. Mokrousov, B. Yan, and A. H. MacDonald, Nat. Phys. **14**, 242 (2018).
21. Y. Deng, Y. Yu, M. Z. Shi, Z. Guo, Z. Xu, J. Wang, X. H. Chen, and Y. Zhang, Science **367**, 895 (2020).
22. C. Liu, Y. Wang, H. Li, Y. Wu, Y. Li, J. Li, K. He, Y. Xu, J. Zhang, and Y. Wang, Nat. Mater. **19**, 522 (2020).
23. J. Ge, Y. Liu, J. Li, H. Li, T. Luo, Y. Wu, Y. Xu, and J. Wang, Natl. Sci. Rev. **7**, 1280 (2020).
24. A. Gao, Y. F. Liu, C. Hu et al. (Collaboration), Nature **595**, 521 (2021).
25. J. Wu, F. Liu, M. Sasase, K. Ienaga, Y. Obata, R. Yukawa, K. Horiba, H. Kumigashira, S. Okuma, T. Inoshita, and H. Hosono, Sci. Adv. **5**, eaax9989 (2019).
26. C. Hu, K. N. Gordon, P. Liu et al. (Collaboration), Nat. Commun. **11**, 97 (2020).
27. I. I. Klimovskikh, M. M. Otrokov, D. A. Estyunin et al. (Collaboration), npj Quantum Mater. **5**, 54 (2020).
28. Z. A. Jahangirli, E. H. Alizade, Z. S. Aliev, M. M. Otrokov, N. A. Ismayilova, S. N. Mammadov, I. R. Amiraslanov, N. T. Mamedov, G. S. Orudzhev, M. B. Babanly, A. M. Shikin, and E. V. Chulkov, J. Vac. Sci. Technol. B **37**, 062910 (2019).
29. R. C. Vidal, A. Zeugner, J. I. Facio et al. (Collaboration), Phys. Rev. X **9**, 041065 (2019).
30. A. M. Shikin, D. A. Estyunin, D. A. Glazkova, S. O. Filnov, and I. I. Klimovskikh, JETP Lett. **115**, 213 (2022).
31. R. C. Vidal, H. Bentmann, J. I. Facio et al. (Collaboration), Phys. Rev. Lett. **126**, 176403 (2021).
32. Y. Hu, L. Xu, M. Shi, A. Luo, S. Peng, Z. Y. Wang, J. J. Ying, T. Wu, Z. K. Liu, C. F. Zhang, Y. L. Chen, G. Xu, X.-H. Chen, and J.-F. He, Phys. Rev. B **101**, 161113(R) (2020).
33. X.-M. Ma, Z. Chen, E. F. Schwier et al. (Collaboration), Phys. Rev. B **102**, 245136 (2020).
34. L. Xu, Y. Mao, H. Wang et al. (Collaboration), Sci. Bull. **65**, 2086 (2020).
35. K. N. Gordon, H. Sun, C. Hu, A. G. Linn, H. Li, Y. Liu, P. Liu, S. Mackey, Q. Liu, N. Ni, and D. Dessau, arXiv:1910.13943 (2019).
36. X. Wu, J. Li, X.-M. Ma et al. (Collaboration), Phys. Rev. X **10**, 031013 (2020).
37. S. Tian, S. Gao, S. Nie et al. (Collaboration), Phys. Rev. B **102**, 035144 (2020).
38. A. M. Shikin, D. A. Estyunin, N. L. Zaitsev, D. A. Glazkova, I. I. Klimovskikh, S. O. Filnov, A. G. Rybkin, K. A. Kokh, O. E. Tereshchenko, K. A. Zvezdin, and A. K. Zvezdin, JETP **134**, 103 (2022).

39. R. Lu, H. Sun, S. Kumar et al. (Collaboration), Phys. Rev. X **11**, 011039 (2021).
40. A. Liang, C. Chen, H. Zheng et al. (Collaboration), Nano Lett. **22**, 4307 (2022).
41. A. M. Shikin, T. P. Makarova, A. V. Eryzhenkov, D. Yu. Usachov, D. A. Estyunin, D. A. Glazkova, I. I. Klimovskikh, A. G. Rybkin, and A. V. Tarasov, arXiv:2205.07501 (2022).
42. T. Ozaki, H. Kino, J. Yu et al. (Collaboration), http://openmx-square.org.
43. N. Troullier and J. L. Martins, Phys. Rev. B **43**, 1993 (1991).
44. T. Ozaki, Phys. Rev. B **67**, 155108 (2003).
45. T. Ozaki and H. Kino, Phys. Rev. B **69**, 195113 (2004).
46. T. Ozaki and H. Kino, Phys. Rev. B **72**, 045121 (2005).
47. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).
48. M. J. Han, T. Ozaki, and J. Yu, Phys. Rev. B **73**, 045110 (2006).
49. S. L. Dudarev, G. A. Botton, S. Y. Savrasov, C. J. Humphreys, and A. P. Sutton, Phys. Rev. B **57**, 1505 (1998).
50. M. Otani and O. Sugino, Phys. Rev. B **73**, 115407 (2006).