Письма в ЖЭТФ, том 118, вып. 5, с. 330 – 337

Взаимосвязь магнетизма и топологии в $MnBi_2Te_4$

В. В. Вальков[1]), *А. О. Злотников, А. Гамов*

Институт физики им. Л. В. Киренского, Федеральный исследовательский центр "Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук", 660036 Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 21 июля 2023 г.
После переработки 26 июля 2023 г.
Принята к публикации 28 июля 2023 г.

При учете структуры трехслойки Te-Mn-Te, входящей в слоевую последовательность Te-Bi-Te-Mn-Te-Bi-Te ван-дер-ваальсовского монокристалла $MnBi_2Te_4$, эффектов кристаллического поля, спин-орбитального взаимодействия и процессов ковалентного смешивания электронных состояний ионов Mn^{2+} с электронными состояниями ионов Te^{2-} в режиме сильных электронных корреляций проанализирована зависимость топологии спектра фермиевских возбуждений от магнитного состояния системы. В ферромагнитной фазе, возникающей благодаря кинематическому взаимодействию фермионов Хаббарда, число Черна равно 1, что соответствует нетривиальной топологии энергетической структуры трехслойки Te-Mn-Te. В парамагнитной фазе число Черна равно нулю и топология тривиальна. Для построенных спин-орбиталей магнитные моменты ионов Mn^{2+} ориентированы перпендикулярно слоям. При этом магнитные моменты Mn^{2+} из ближайших слоев по механизму Андерсона упорядочены антиферромагнитно.

DOI: 10.31857/S1234567823170044, EDN: jznnvq

1. Введение. Формирование дальнего магнитного порядка в топологических изоляторах приводит к ряду нетривиальных эффектов, таких как формирование щели в спектре возбуждений поверхностных состояний и реализация квантового аномального эффекта Холла [1–3]. Недавно нетривиальная топология электронной структуры с формированием объемных инвертированных зон, а также дираковского конуса, соответствующего поверхностным состояниям, при реализации дальнего антиферромагнитного (АФМ) порядка были предсказаны в $MnBi_2Te_4$ на основе первопринципных расчетов [4–6], а также подтверждены с помощью ARPES [5, 7]. Таким образом, $MnBi_2Te_4$ относится к АФМ топологическим изоляторам, описанным ранее [8].

Соединение $MnBi_2Te_4$ содержит последовательность из семи слоев Te-Bi-Te-Mn-Te-Bi-Te (семислойка), расположенных перпендикулярно оси z [9]. Каждый слой обладает треугольной решеткой. Магнитная структура Mn характеризуется наличием анизотропии типа "легкая ось" перпендикулярно слоям [10]. Внутри слоя реализуется ферромагнитное упорядочение ионов Mn. Данные по неупругому рассеянию нейтронов демонстрируют также наличие конкурирующего АФМ обмена между следующими за ближайшими соседями в слое с величиной обменной связи, близкой к критической, когда происходит смена типа магнитной структуры [11]. Между слоями Mn формируется АФМ упорядочение типа A с температурой Нееля 24 K.

Несмотря на наличие первопринципных расчетов электронной структуры $MnBi_2Te_4$, получение эффективной низкоэнергетической модели позволяет существенно продвинуться в понимании и упрощении описания топологических особенностей материала и поверхностных состояний. Ранее была сформулирована эффективная модель двухслоек Te-Bi с учетом вкладов от магнитных ионов Mn [4]. В рамках этой модели было показано, что поверхностные состояния распространяются вглубь на расстояние, соответствующее двум семислойкам [12].

Топологический инвариант принимает нетривиальные значения для пленок $MnBi_2Te_4$, содержащих нечетное число семислоек [6, 13]. Таким образом, интерес представляют соединения с нескомпенсированным магнитным моментом у поверхности. В этом случае возникает щель в дираковском конусе поверхностных состояний АФМ топологического изолятора, сопровождаемая нарушением симметрии по отношению к последовательному действию операции инверсии времени и примитивной трансляции. Известно, что для разных образцов величина щели сильно варьируется от исчезающе малой до десятков мэВ. Возможные причины этого обсуждались в миниобзоре [14].

Несмотря на отмеченные успехи в понимании природы возникновения нетривиальной топологии в $MnBi_2Te_4$, ряд вопросов остается проблематич-

[1])e-mail : vvv@iph.krasn.ru

ным. Загадочной, в частности, представляется причина формирования ферромагнитного упорядочения в слоях ионов марганца при диэлектрическом характере основного состояния рассматриваемого соединения. Малоизученной является и причина происхождения сильной одноосной анизотропии в слоях ионов марганца. При рассмотрении этих тем первостепенное значение приобретает вопрос о влиянии процессов ковалентного смешивания спин-орбиталей ионов марганца и теллура на энергетическую структуру системы и ее топологические свойства.

Эти вопросы обсуждаются в данной работе.

2. Базисные состояния Te-Mn-Te и гамильтониан трехслойки в представлении Ванье. Существенную роль в формировании нетривиальной топологии энергетической структуры топологического магнетика $MnBi_2Te_4$ играют подсистемы из трех слоев Te-Mn-Te. Они образованы из слоя ионов Mn^{2+}, выше и ниже которого находятся слои ионов Te^{2-}. В каждом слое ионы находятся в узлах треугольной решетки. При этом узлы решеток теллура смещены относительно положения ионов марганца так, как показано на рис. 1.

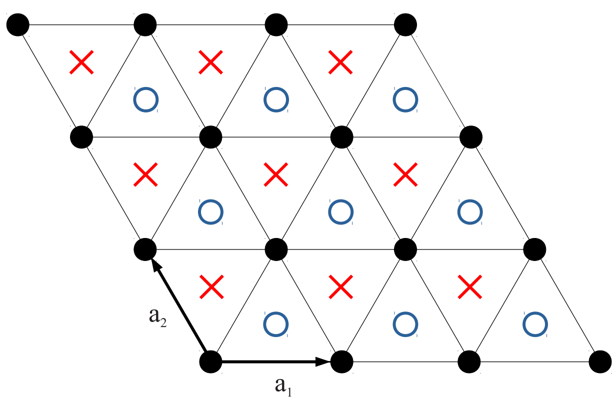

Рис. 1. (Цветной онлайн) Фрагмент кристаллической структуры трехслойки Te–Mn–Te. Положения ионов Mn^{2+}, обозначенных темными кружками, образуют треугольную решетку в средней плоскости трехслойки. Над ними и под ними находятся ионы Te^{2-}, упорядоченные по схеме треугольной решетки. Проекции центров верхних ионов Te^{2-} на плоскость расположения Mn^{2+} показаны красными крестиками. Светлыми кружками обозначены проекции на среднюю плоскость положений ионов Te^{2-}, лежащих в нижней плоскости трехслойки

При построении базиса электронных состояний и гамильтониана, отражающего структуру энергетических зон, находящихся вблизи химпотенциала, будем основываться на характере расщепления электронных конфигураций $3d^5$ ионов Mn^{2+} и $5p^6$ ионов Te^{2-} под влиянием кристаллического поля (КП) и спин-орбитального взаимодействия (СОВ).

Ионы Mn^{2+} находятся в КП тригональной симметрии (точечная группа $\mathbf{D}_{3d}$). Поэтому десятикратно вырожденный (при учете спина электрона) $3d$-уровень в соответствие с теоремой Крамерса расщепляется на совокупность дублетов.

Применение теоремы Вигнера–Эккарта позволяет установить взаимосвязь между расщепленными уровнями энергий и видом спин-орбиталей на основе эквивалентного гамильтониана (ЭГ). Для группы $\mathbf{D}_{3d}$ этот гамильтониан записывается в виде [15]

$$H_0 = B_2^0 \hat{O}_2^0 + B_4^0 \hat{O}_0^4 + B_4^3 \hat{O}_4^3 - \lambda(\mathbf{Ls}), \quad (1)$$

где $\hat{O}_n^m$ – операторы Стивенса [16], а $\mathbf{L}$ и $\mathbf{s}$ – векторные операторы орбитального момента и спина электрона соответственно. Коэффициенты B_n^m являются параметрами КП, λ – константа СОВ.

Поскольку главные эффекты расщепления связаны с октаэдрическими компонентами КП, то большая часть состояний ЭГ сохраняет классификацию по проекциям орбитального момента и спина.

При выполнении неравенств

$$5B_4^0 < B_2^0 < -(20/3)B_4^0, \quad B_4^0 < 0 \quad (2)$$

реализуется ситуация, когда наполовину заполненному дублету соответствуют спин-орбитали $|\Psi_{f\sigma}^{(d)}\rangle$ [17]

$$|\Psi_{f\uparrow}^{(d)}\rangle = a|f;+2\uparrow\rangle + b|f;-1\uparrow\rangle + c|f;0\downarrow\rangle,$$
$$|\Psi_{f\downarrow}^{(d)}\rangle = a|f;-2\downarrow\rangle - b|f;+1\downarrow\rangle - c|f;0\uparrow\rangle. \quad (3)$$

При этом два других полностью занятых электронами дублета обладают меньшими энергиями и для дальнейшего рассмотрения становятся несущественными. Оставшиеся два дублета обладают значительно большими энергиями и ими можно пренебречь.

Здесь и в дальнейшем принято, что ионы Mn^{2+} находятся в узлах, нумеруемых латинскими буквами $f, f', \ldots$. Положения этих ионов формируют F-подрешетку. Правые части (3) представляют суперпозицию состояний, каждое из которых в обозначениях кет-векторов характеризуется номером узла f, значением проекции орбитального момента d состояния, а также проекцией спина. В расчетах использовались значения параметров ЭГ: $B_2^0 = 0.3$, $B_4^0 = -0.2$, $< B_4^3 = 0.1$, $\lambda = -0.2$. При этом $|a| \gg |b|, |c|$.

Важность спин-орбиталей $|\Psi_{f\sigma}^{(d)}\rangle$ обусловлена тем, что они образуют базисные функции, из которых формируется коллективизированная зона, связанная с $3d$ состояниями ионов марганца и которая находится вблизи химпотенциала. Существенным для дальнейшего является превалирующий вклад в спин-орбитали состояний с наибольшими по абсолютной величине значениями $J_z = L_z + s_z$.

Используя этот базис, в схеме сильной связи запишем гамильтониан H_d, отражающий подсистему электронных состояний, находящихся на ионах Mn^{2+}

$$\hat{H}_d = \sum_f [\varepsilon_d \hat{n}_f + U \hat{n}_{f\uparrow}\hat{n}_{f\downarrow}] + \sum_{ff'\sigma} t^d_{ff'} d^+_{f\sigma} d_{f'\sigma}. \quad (4)$$

Суммирование по индексам f, f' соответствует суммированию по тем узлам решетки, в которых находятся ионы марганца. Фермиевские операторы $d^+_{f\sigma}(d_{f\sigma})$ используются для описания процессов рождения (уничтожения) электронов на узлах f с проекцией спина $\sigma = \pm 1/2$, $\hat{n}_{f\sigma} = d^+_{f\sigma} d_{f\sigma}$ – оператор числа электронов на узле f с проекцией спина σ. Величина ε_d обозначает энергию электрона на ионе Mn^{2+}, энергия хаббардовского отталкивания обозначена через U, $t^d_{ff'}$ – интеграл перескока электрона между ионами марганца, находящимися на узлах f и f'. Видно, что оператор $\hat{H}_d$ является гамильтонианом модели Хаббарда [18] для треугольной решетки.

Для состояний, связанных с ионами Te^{2-}, будем использовать индексы $g, g', \ldots$ для ионов в слое, находящемся над слоем ионов марганца (красные крестики на рис. 1). Индексами $l, l', \ldots$ будем нумеровать положения узлов тех ионов Te^{2-}, которые находятся ниже слоя ионов марганца (синие кружки на рис. 1).

Спин-орбитали $|\Psi^{(p)}_{g\sigma}\rangle$ и $|\Psi^{(p)}_{l\sigma}\rangle$, возникающие при расщеплении термов конфигураций $5p^6$ ионов Te^{2-}, находящихся в узлах g и l, под влиянием поля тригональной симметрии (точечная группа $\mathbf{C}_{3v}$) и СОВ, как и в модели BHZ (Bernevig–Hughes–Zhang) [19–22], записываются в виде

$$\begin{aligned} |\Psi^{(p)}_{g\uparrow}\rangle &= |g; 1\uparrow\rangle, \quad |\Psi^{(p)}_{g\downarrow}\rangle = |g; -1\downarrow\rangle, \\ |\Psi^{(p)}_{l\uparrow}\rangle &= |l; 1\uparrow\rangle, \quad |\Psi^{(p)}_{l\downarrow}\rangle = |l; -1\downarrow\rangle. \end{aligned} \quad (5)$$

В правых сторонах этих равенств кет-вектора обозначают центрированную на узлах g или l p-волновую функцию с заданными значениями проекций орбитального момента ± 1 и спина.

Учитывая, что спин-орбитали ионов Te^{2-} образуют две подсистемы электронных p состояний, запишем для них гамильтониан H_p в виде

$$\begin{aligned} \hat{H}_p = \sum_{g\sigma} \varepsilon_p p^+_{1g\sigma} p_{1g\sigma} + \sum_{l\sigma} \varepsilon_p p^+_{2l\sigma} p_{2l\sigma} + \\ + \sum_{gg'\sigma} t^p_{gg'} p^+_{1g\sigma} p_{1g'\sigma} + \sum_{ll'\sigma} t^p_{ll'} p^+_{2l\sigma} p_{2l'\sigma} + \\ + \sum_{gl\sigma} \{ t^p_{gl} p^+_{1g\sigma} p_{2l\sigma} + \text{h.c.} \}. \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь суммирование по индексам g и l означает суммирование по узлам ионов теллура, находящихся в верхней и нижней плоскости относительно плоскости ионов марганца соответственно. Операторы $p^+_{1g\sigma}(p_{1g\sigma})$ являются операторами рождения (уничтожения) p электрона на узле g с проекцией спина $\sigma = \pm 1/2$. Аналогичное обозначение (при замене индекса g на индекс l) используется для электронов, занимающих спин-орбитали в нижней плоскости ионов теллура. Энергия p спин-орбитали обозначена посредством ε_p. $t^p_{gg'}$ $(t^p_{ll'})$ – интегралы перескоков p электрона между ионами теллура, находящимися в верхней (нижней) плоскости и занимающими узлы с номерами g, g' (l, l') соответственно. Интеграл перескока t^p_{gl} определяет интенсивность процессов перемешивания электронных спин-орбиталей, находящихся на ионах теллура из разных слоев.

Важную роль в формировании нетривиальной топологии энергетической структуры рассматриваемой системы играют процессы ковалентного смешивания (гибридизации) спин-орбиталей ионов Te^{2-} и спин-орбиталей ионов Mn^{2+}. Интенсивность таких процессов определяется интегралом перескока электронов между отмеченными группами состояний. При этом принципиальное значение приобретает не столько абсолютная величина отмеченных интегралов, сколько их зависимость от направления перескока.

При учете процессов $p-d$ гибридизации только между ближайшими ионами Mn^{2+} и Te^{2-} оператор ковалентного смешивания запишется в виде

$$\begin{aligned} \hat{T}_{pd} = \sum_{f\delta\sigma} \{ t^\sigma_{pd}(\delta) d^+_{f\sigma} p_{1f+\delta\sigma} + \text{h.c.} \} + \\ + \sum_{f\gamma\sigma} \{ t^\sigma_{pd}(\gamma) d^+_{f\sigma} p_{2f+\gamma\sigma} + \text{h.c.} \}. \end{aligned} \quad (7)$$

Здесь введены векторы δ и γ, соединяющие ионы марганца с ближайшими ионами теллура, находящимися в верхней и нижней плоскости рассматриваемой трехслойки соответственно.

Параметрами гибридизации служат матричные элементы оператора кинетической энергии $\hat{T}$

$$t^\sigma_{pd}(\delta) = \langle \Psi^{(d)}_{f\sigma} | \hat{T} | \Psi^{(p)}_{f+\delta,\sigma} \rangle, \quad (8)$$

$$t^\sigma_{pd}(\gamma) = \langle \Psi^{(d)}_{f\sigma} | \hat{T} | \Psi^{(p)}_{f+\gamma,\sigma} \rangle. \quad (9)$$

Вычисления показывают, что их зависимость от векторов δ и γ имеет вид

$$t_{pd}^{\sigma}(\delta) = t_{pd}\begin{cases} (1 - i\eta_\sigma\sqrt{3})/2, & \delta = (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)/3, \\ -1, & \delta = (\mathbf{a}_1 + 2\mathbf{a}_2)/3, \\ (1 + i\eta_\sigma\sqrt{3})/2, & \delta = -(2\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)/3, \end{cases} \tag{10}$$

$$t_{pd}^{\sigma}(\gamma) = t_{pd}\begin{cases} -(1 + i\eta_\sigma\sqrt{3})/2, & \gamma = (2\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)/3, \\ 1, & \gamma = -(\mathbf{a}_1 + 2\mathbf{a}_2)/3, \\ -(1 - i\eta_\sigma\sqrt{3})/2, & \gamma = (\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1)/3. \end{cases} \tag{11}$$

В этих формулах $\mathbf{a}_1$ и $\mathbf{a}_2$ вектора элементарных трансляций, показанные на рис. 1.

Кроме процессов ковалентного смешивания p и d состояний, существенным является учет обменной связи между этими фермионами

$$\hat{J}_{pd} = -\sum_{f\delta\sigma} J p_{1f+\delta\sigma}^{+}\,(\mathbf{S}_f \boldsymbol{\tau}_{\sigma\sigma'})\, p_{1f+\delta\sigma'} - \\ -\sum_{f\gamma\sigma} J p_{2f+\gamma\sigma}^{+}\,(\mathbf{S}_f \boldsymbol{\tau}_{\sigma\sigma'})\, p_{2f+\gamma\sigma'}, \tag{12}$$

где J – параметр обменного взаимодействия, а $\mathbf{S}_f$ – векторный квазиспиновый оператор, компоненты которого определяются выражениями

$$S_f^x = (X_f^{\uparrow\downarrow} + X_f^{\downarrow\uparrow})/2, \quad S_f^y = (X_f^{\uparrow\downarrow} - X_f^{\downarrow\uparrow})/(2i), \\ S_f^z = (X_f^{\uparrow\uparrow} - X_f^{\downarrow\downarrow})/2. \tag{13}$$

Операторы Хаббарда X_f^{nm} [23–25] описывают переходы ионов в узлах с номерами f из состояния $|f,m\rangle$ в состояние $|f,n\rangle$. В (12) $\boldsymbol{\tau}_{\sigma\sigma'}$ – вектор, компонентами которого являются матричные элементы матриц Паули $\tau_{\sigma\sigma'}^x$, $\tau_{\sigma\sigma'}^y$, $\tau_{\sigma\sigma'}^z$.

Суммируя сказанное, получаем гамильтониан трехслойки Te-Mn-Te

$$\hat{H} = \hat{H}_d + \hat{H}_p + \hat{T}_{pd} + \hat{J}_{pd}. \tag{14}$$

3. Энергетическая структура Te-Mn-Te. При нахождении спектра фермиевских состояний трехслойки Te-Mn-Te и вычислении топологического индекса получающейся энергетической структуры примем во внимание известные свойства $MnBi_2Te_4$, влияющие на выбор соотношений между параметрами гамильтониана (14):

1. В пределах одного слоя магнитные моменты ионов Mn^{2+} при низких температурах упорядочены ферромагнитно, тогда как моменты этих ионов из соседних слоев ориентированы противоположно по отношению друг к другу.

2. Наличие фрустрированных обменных связей, близких к критическим значениям [11], между ионами марганца, находящимися в одном слое и не являющимися ближайшими соседями.

3. Диэлектрический характер основного состояния $MnBi_2Te_4$ при том, что электронная конфигурация ($3d^5$) ионов марганца характеризуется нечетным числом электронов.

Если механизм прямого гейзенберговского обмена мог бы дать объяснение ферромагнитной связи между ближайшими ионами Mn^{2+} из одного слоя, то интерпретация второго свойства в рамках такой концепции невозможна.

Обычный зонный подход представляется проблематичным, если учитывается третье свойство.

Отмеченные затруднения обуславливают использование подхода, основанного на предположении о наличии сильных электронных корреляций (СЭК) в подсистеме ионов марганца. В основу такого предположения положены следующие утверждения:

1. Точный результат Нагаоки [26] о том, что в модели Хаббарда в пределе $U \longrightarrow \infty$ основное состояние системы с одной дыркой (число электронов $N_e = N - 1$) является ферромагнитным.

2. Поскольку в Te-Mn-Te концентрация $n_d \simeq 1$, то ферромагнитное состояние в слое ионов Mn^{2+} реализуется по сценарию, соответствующему режиму сильных электронных корреляций $U \gg |t_{ff'}^d|$. При этом возникновение фрустрированных связей представляется вполне естественным, поскольку во втором порядке теории возмущений по параметру $|t_{ff'}^d|/U$ по механизму Андерсона возникает антиферромагнитная связь.

3. Данные первопринципных расчетов [5, 6] по электронной структуре $MnBi_2Te_4$ приводят к значениям параметра хаббардовского отталкивания для электронов ионов марганца $U \simeq (4-5)$ эВ.

Учитывая электрон-дырочную симметрию гамильтониана Хаббарда $\hat{H}_d$, воспользуемся дырочным представлением. Поскольку концентрация дырок n_d в d подсистеме в расчете на одну ячейку не превышает 1, то в режиме СЭК, когда $U \gg |t_{ff'}^d|$ [27–29], актуальной является нижняя подзона фермионов Хаббарда.

Состояния верхней хаббардовской подзоны обладают большой энергией и их заселенность незначительна. Влияние процессов виртуальных переходов в эти состояния можно учесть на основе теории возмущений по параметрам малости $|t_{ff'}^d|/U \ll 1$ и $|t_{pd}|/U \ll 1$. Ниже при решении задачи о спектре возбуждений и ферромагнитном состоянии магнитных моментов ионов марганца ограничимся приближением, когда отмеченные процессы не учитываются.

Переходя к представлению квазиимпульса

$$p_{1f+\delta\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k e^{ik(f+\delta)}p_{1k\sigma}, \quad (15)$$

$$p_{2f+\gamma\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k e^{ik(f+\gamma)}p_{2k\sigma}, \quad (16)$$

$$X_f^{0\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k e^{ikf}X_{k\sigma}, \quad (17)$$

получим

$$\begin{aligned} \hat{H}_d &= \sum_{k\sigma}(\varepsilon_d + t_{dk})X_{k\sigma}^+X_{k\sigma}, \\ \hat{H}_p &= \sum_{k\sigma}[\varepsilon_p(k)(p_{1k\sigma}^+p_{1k\sigma} + p_{2k\sigma}^+p_{2k\sigma})] - \\ &- \sum_{k\sigma}[t_{12}(k)p_{1k\sigma}^+p_{2k\sigma} + \text{h.c.}], \quad (18)\\ \hat{T}_{pd} &= -\sum_{k\sigma}(t_{1k\sigma}X_{k\sigma}^+p_{1k\sigma} + t_{2k\sigma}X_{k\sigma}^+p_{2k\sigma} + \text{h.c.}), \\ \hat{J}_{pd} &= -\frac{3J}{N}\sum_{\lambda=1}^{2}\sum_{fkq\sigma\sigma'} e^{if(q-k)}p_{\lambda k\sigma}^+ (\mathbf{S}_f\boldsymbol{\tau}_{\sigma\sigma'})\, p_{\lambda q\sigma'}, \end{aligned}$$

где введены следующие обозначения

$$\begin{gathered} t_{dk} = 6t_d\gamma_{1k},\ \varepsilon_p(k) = -\varepsilon_p - 6t_p\gamma_{1k}, \\ \gamma_{1k} = \{\cos k_1 + \cos k_2 + \cos(k_1+k_2)\}/3, \\ t_{12}(k) = t_{12}\{\varphi_{1k} + \varphi_{2k} + \varphi_{3k}\}, \quad (19)\\ t_{1k\sigma} = t_{pd}\{r_\sigma\varphi_{1k} - \varphi_{2k} + r_\sigma^*\varphi_{3k}\},\ t_{2k\sigma} = -t_{1k\bar{\sigma}}^*, \\ \varphi_{1k} = \exp[i(k_1-k_2)/3],\ \varphi_{2k} = \exp[i(k_1+2k_2)/3], \\ \varphi_{3k} = \exp[-i(2k_1+k_2)/3], \quad r_\sigma = (1 - i\eta_\sigma\sqrt{3})/2. \end{gathered}$$

Здесь t_d и t_p – интегралы перескоков электронов между спин-орбиталями ближайших ионов Mn^{2+} и Te^{2-}, находящихся в одном слое треугольной решетки, соответственно.

Важная особенность фурье-образов интегралов $p-d$ гибридизации $t_{1k\sigma}$ и $t_{2k\sigma}$ заключается в том, что значение спиновой переменной влияет на характер их квазиимпульсной зависимости. Это обстоятельство в условиях перекрытия нижней дырочной d подзоны с подзоной p состояний приводит к нечетному значению числа Черна для энергетической структуры и реализации нетривиальной топологии при наличии ферромагнитного упорядочения.

Квазиимпульсная зависимость интегралов перескока электрона между ближайшими спин-орбиталями из разных слоев ионов Te^{2-} трехслойки Te-Mn-Te описывается $t_{12}(k)$, при этом t_{12} – амплитуда отмеченного процесса.

Для вычисления энергетической структуры трехслойки, получения уравнений самосогласования и определения ее топологических свойств введем трехкомпонентный оператор поля

$$\hat{\Psi}_{k\sigma}^+ = \left(p_{1k\sigma}^+,\quad X_{k\sigma}^+,\quad p_{2k\sigma}^+\right) \quad (20)$$

и определим двухвременную запаздывающую [30, 31] матричную функцию Грина (ФГ) $\hat{D}_{k\sigma}(\omega)$ в соответствии с преобразованием Фурье

$$\langle\langle\hat{\Psi}_{k\sigma}(t)|\hat{\Psi}_{k\sigma}^+(t')\rangle\rangle = \int\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega(t-t')}\hat{D}_{k\sigma}(\omega). \quad (21)$$

Операторы поля $\hat{\Psi}_{k\sigma}$ и $\hat{\Psi}_{k\sigma}^+$ берутся в гейзенберговском представлении в моменты времени t и t'.

Используя метод проецирования Цванцига–Мори [32, 33], получим, что ФГ удовлетворяет уравнению

$$\left[\omega\hat{I} - \hat{M}_\sigma(k)\right]\hat{D}_{k\sigma}(\omega) = \hat{P}_\sigma, \quad (22)$$

где $\hat{P}_\sigma$ – диагональная матрица с элементами $(1,\ N_{0\sigma},\ 1)$, $N_{0\sigma} = \langle X_f^{00} + X_f^{\sigma\sigma}\rangle$.

В (22) $\hat{I}$ – единичная матрица, а $\hat{M}_\sigma(k)$ имеет вид

$$\hat{M}_\sigma(k) = \begin{pmatrix} \varepsilon_{p\sigma}(k) & -t_{1k\sigma}^* & -t_{12}(k) \\ -N_{0\sigma}t_{1k\sigma} & \varepsilon_{dk\sigma} & -N_{0\sigma}t_{2k\sigma} \\ -t_{12}^*(k) & -t_{2k\sigma}^* & \varepsilon_{p\sigma}(k) \end{pmatrix}, \quad (23)$$

где $\varepsilon_{p\sigma}(k) = \varepsilon_p(k) - 2J_0M\sigma$, $J_0 = 3J$, $\sigma = \pm1/2$, $M = \langle S_f^z\rangle$, $\varepsilon_{dk\sigma}$ – энергия фермионов Хаббарда в d подсистеме, ренормированная за счет кинематического взаимодействия

$$\varepsilon_{dk\sigma} = \varepsilon_d + N_{0\sigma}t_{dk} - \frac{1}{N_{0\sigma}N}\sum_q t_q\langle X_{q\bar{\sigma}}^+X_{q\bar{\sigma}}\rangle. \quad (24)$$

Из уравнения (22) находим три ветви спектра:

$$\begin{aligned} E_{1k\sigma} &= -W_{k\sigma}/2 - \lambda_{k\sigma} - a_{k\sigma}/3, \\ E_{2k\sigma} &= -W_{k\sigma}/2 + \lambda_{k\sigma} - a_{k\sigma}/3, \quad (25)\\ E_{3k\sigma} &= W_{k\sigma} - a_{k\sigma}/3. \end{aligned}$$

Входящие в эти формулы функции квазиимпульса и проекции спина:

$$\begin{aligned} W_{k\sigma} &= Z_{k\sigma} - P_{k\sigma}/Z_{k\sigma}, \\ Z_{k\sigma} &= \left(\sqrt{Q_{k\sigma}^2 + P_{k\sigma}^3} - Q_{k\sigma}\right)^{1/3}, \quad (26)\\ \lambda_{k\sigma} &= \sqrt{-3P_{k\sigma} - 3W_{k\sigma}^2/4} \end{aligned}$$

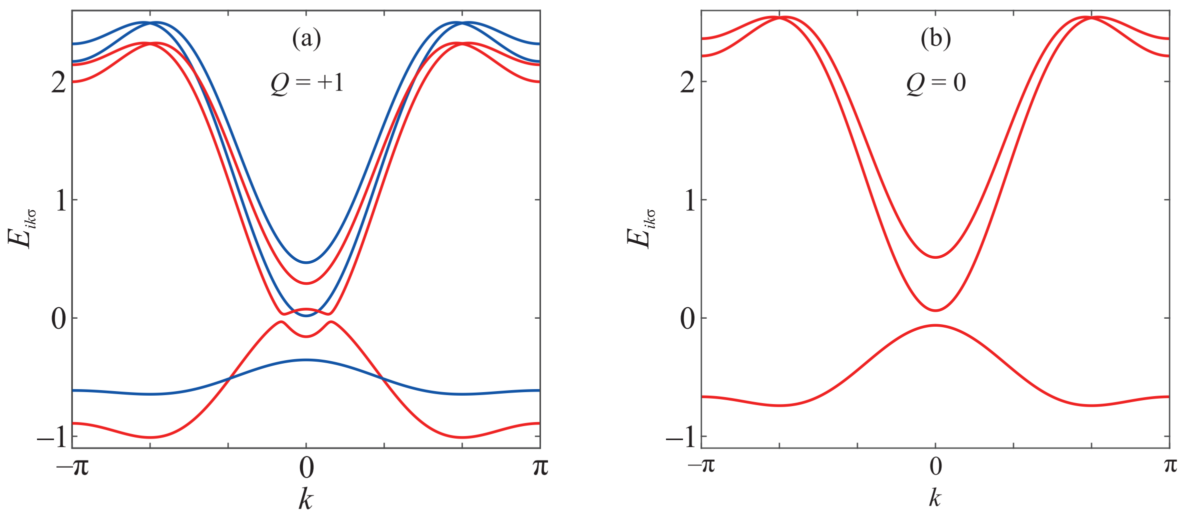

Рис. 2. (Цветной онлайн) Спектр фермиевских возбуждений для двух состояний: (a) – ненасыщенный ферромагнетизм (красные линии соответствуют ветвям спектра с $\sigma = +1/2$, синие линии для $\sigma = -1/2$); (b) – парафаза, ветви вырождены по проекции спина. Вычисления проводились при значениях параметров: $t_p = 0.25$, $t_d = 0.15$, $t_{pd} = 0.05$, $J = 0.1$, $t_{12} = 0.075$, $\Delta_0 = 0.1$ – параметр, определяющий перекрытие затравочных d и p зон. При этом $n_d = 0.97$, $M = 0.28$. Для феррофазы число Черна $Q = 1$ (топология энергетической структуры нетривиальна). Для парафазы $Q = 0$ (топология энергетической структуры тривиальна)

связаны с исходными энергетическим величинами:

$$\begin{gathered} P_{k\sigma} = (b_{k\sigma} - a_{k\sigma}^2/3)/3, \\ Q_{k\sigma} = (c_{k\sigma} + 2a_{k\sigma}^3/27 - a_{k\sigma}b_{k\sigma}/3)/2, \\ a_{k\sigma} = -(2\varepsilon_{p\sigma}(k) + \varepsilon_{dk\sigma}), \quad b_{k\sigma} = 2\varepsilon_{p\sigma}(k)\varepsilon_{dk\sigma} + \\ + \varepsilon_{p\sigma}^2(k) - |t_{12}(k)|^2 - N_{0\sigma}(|t_{1k\sigma}|^2 + |t_{2k\sigma}|^2), \qquad (27) \\ c_{k\sigma} = -\varepsilon_{p\sigma}^2(k)\varepsilon_{dk\sigma} + N_{0\sigma}\left[t_{12}(k)t_{1k\sigma}t_{2k\sigma}^* + \text{h.c.}\right] + \\ + \varepsilon_{dk\sigma}|t_{12}(k)|^2 + \varepsilon_{p\sigma}(k)N_{0\sigma}\left(|t_{1k\sigma}|^2 + |t_{2k\sigma}|^2\right). \end{gathered}$$

Для замыкания уравнений самосогласования использовались найденные из (22) компоненты ФГ:

$$\begin{gathered} D_{11}^{\sigma}(k,\omega) = \frac{(\omega - \varepsilon_{dk\sigma})(\omega - \varepsilon_{pk\sigma}) - N_{0\sigma}|t_{2k\sigma}|^2}{\det_3^{\sigma}(k,\omega)}, \\ D_{22}^{\sigma}(k,\omega) = N_{0\sigma}\frac{(\omega - \varepsilon_{pk\sigma})^2 - |t_{12}(k)|^2}{\det_3^{\sigma}(k,\omega)}, \qquad (28) \\ D_{33}^{\sigma}(k,\omega) = D_{11}^{\sigma}(k,\omega), \end{gathered}$$

где $\det_3^{\sigma}(k,\omega)$ – детерминант третьего порядка матрицы $[\omega\hat{I} - \hat{M}_{\sigma}(k)]$.

С помощью этих функций по спектральной теореме получаем необходимые выражения для средних

$$N_{\sigma} = \langle X_f^{\sigma\sigma}\rangle = \frac{N_{0\sigma}}{N}\sum_q \frac{(E_{1q\sigma} - \varepsilon_{pq\sigma})^2 - |t_{12}(q)|^2}{\lambda_{q\sigma}(3W_{q\sigma} + 2\lambda_{q\sigma})},$$

$$N_{p\sigma} = \frac{2}{N}\sum_q \frac{(E_{1q\sigma} - \varepsilon_{dq\sigma})(E_{1q\sigma} - \varepsilon_{pq\sigma}) - N_{0\sigma}|t_{2q\sigma}|^2}{\lambda_{q\sigma}(3W_{q\sigma} + 2\lambda_{q\sigma})},$$

где $N_{p\sigma}$ – узельная концентрация дырок с проекцией спина σ в p подсистеме, а $n_d = N_{\uparrow} + N_{\downarrow}$ – полная концентрация фермионов Хаббарда в расчете на один узел.

Полученные уравнения позволяют проанализировать ферромагнитную и парамагнитную фазы и установить изменение топологии энергетического спектра при изменении магнитного состояния системы.

4. Топологический индекс энергетической структуры фермионных состояний Te-Mn-Te. Как известно, топологический индекс (число Черна) определяется выражением

$$Q = -\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} dk_1 \int_{-\pi}^{\pi} dk_2 B(k), \qquad (29)$$

в котором кривизна Берри $B(k)$

$$B(k) = \frac{\partial A_2(k)}{\partial k_1} - \frac{\partial A_1(k)}{\partial k_2} \qquad (30)$$

находится в результате дифференцирования по квазиимпульсам величин $A_1(k)$ и $A_2(k)$, получаемых в результате усреднения по блоховскому состоянию операторов $-i\partial/\partial k_1$ и $-i\partial/\partial k_2$ соответственно [34]:

$$A_{1(2)}(k) = -i\langle\psi_k|\frac{\partial}{\partial k_{1(2)}}|\psi_k\rangle. \qquad (31)$$

Для установления связи кривизны Берри с энергетическими величинами решим задачу о нахождении собственных векторов $\mathbf{R}_{k\sigma}$ (см., например, [35, 36])

$$\mathbf{R}_{k\sigma} \equiv (u_{k\sigma},\ v_{k\sigma},\ z_{k\sigma}) \tag{32}$$

матрицы $\hat{M}_\sigma(k)$, определенной в (23),

$$\hat{M}_\sigma(k)\mathbf{R}_{k\sigma} = E_{k\sigma}\mathbf{R}_{k\sigma}. \tag{33}$$

После несложных вычислений получаем выражение для кривизны Берри, соответствующей нижней заполненной зоне

$$B_\sigma(k) = i\left[\frac{\partial v^*_{k\sigma}}{\partial k_2}\frac{\partial v_{k\sigma}}{\partial k_1} - \frac{\partial v^*_{k\sigma}}{\partial k_1}\frac{\partial v_{k\sigma}}{\partial k_2}\right] + \\ + i\left[\frac{\partial z^*_{k\sigma}}{\partial k_2}\frac{\partial z_{k\sigma}}{\partial k_1} - \frac{\partial z^*_{k\sigma}}{\partial k_1}\frac{\partial z_{k\sigma}}{\partial k_2}\right], \tag{34}$$

где

$$v_{k\sigma} = \frac{\Phi_{k\sigma}}{\sqrt{1+|\Phi_{k\sigma}|^2+|\Psi_{k\sigma}|^2}}, \\ z_{k\sigma} = \frac{\Psi_{k\sigma}}{\sqrt{1+|\Phi_{k\sigma}|^2+|\Psi_{k\sigma}|^2}}. \tag{35}$$

Входящие в эти выражения функции определены следующим образом

$$\Phi_{k\sigma} = N_{0\sigma}\frac{t^*_{12}(k)t_{2k\sigma} - t_{1k\sigma}(E_{1k\sigma} - \varepsilon_{dk\sigma})}{D_{1k\sigma}}, \tag{36}$$

$$\Psi_{k\sigma} = \frac{N_{0\sigma}t_{1k\sigma}t^*_{2k\sigma} - t^*_{12}(k)(E_{1k\sigma} - \varepsilon_{dk\sigma})}{D_{1k\sigma}}, \tag{37}$$

$$D_{k\sigma} = (E_{1k\sigma} - \varepsilon_{dk\sigma})[E_{1k\sigma} - \varepsilon_{p\sigma}(k)] - N_{0\sigma}|t_{2k\sigma}|^2. \tag{38}$$

Применение полученных выражений для ферро- и парафазы показывает, что в первом случае топология энергетической структуры фермиевского спектра является нетривиальной ($Q = 1$), тогда как во втором случае $Q = 0$ и топология тривиальна.

Данный результат, продемонстрированный на рис. 2, говорит о сильной взаимосвязи между магнетизмом и топологией в $MnBi_2Te_4$.

5. Заключение. Показано, что в ван-дер-ваальсовом материале $MnBi_2Te_4$ эффекты $p-d$ ковалентного смешивания спин-орбитальных электронных состояний ионов Mn^{2+} и Te^{2-} в трехслойках Te-Mn-Te имеют принципиальное значение для формирования нетривиальной топологии энергетической структуры в условиях дальнего магнитного порядка, если:

1. Совместное влияние кристаллического поля и спин-орбитального взаимодействия приводит к такой иерархии крамерсовских дублетов расщепленной $3d^5$ электронной конфигурации ионов Mn^{2+}, что наполовину заполненный спин-орбитальный дублет характеризуется значениями: $\bar{L}_z \simeq 2$, $\bar{s}_z \simeq 1/2$ и $\bar{L}_z \simeq -2$, $\bar{s}_z \simeq -1/2$.

2. Верхним спин-орбитальным дублетам, сформированным из электронных конфигураций $5p^6$ ионов Te^{2-} под влиянием отмеченных выше взаимодействий, как и в модели BHZ, соответствуют состояния $|1\uparrow\rangle$ и $|-1\downarrow\rangle$.

3. Внутриатомное кулоновское отталкивание электронов в ионах марганца достаточно сильно для реализации режима сильных электронных корреляций. В этом случае благодаря кинематическому взаимодействию фермионов Хаббарда [37] в слое ионов марганца устанавливается ферромагнитное состояние, которое инициирует расщепление спиновых p подзон. Это способствует реализации условий, когда возникает перекрытие по энергии верхней подзоны фермионов Хаббарда с p подзонами фермионов, связанных со спин-орбиталями ионов Te^{2-}. При этом число Черна приобретает значение $+1$, соответствующее нетривиальной топологии энергетической структуры.

4. В парамагнитной фазе перекрытие зон исчезает и топология энергетической структуры становится тривиальной. Эти факторы устанавливают взаимосвязь между ферромагнитным упорядочением магнитных моментов в слое ионов марганца с топологией энергетической структуры Te-Mn-Te.

Следует подчеркнуть, что в соответствие с характером спин-орбиталей ионов марганца магнитные моменты этих ионов в упорядоченной фазе ориентируются перпендикулярно слоям. В этом случае анизотропия является сильной, что приводит к изинго-подобному поведению магнитного слоя ионов марганца. При этом процессы перескоков фермионов между отмеченными слоями приведут по механизму Андерсона к установлению антиферромагнитной связи между магнитными моментами из разных слоев. Отмеченная картина полностью соответствует данным эксперимента.

Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда # 23-22-10021, https://rscf.ru/project/23-22-10021/ и Красноярского краевого фонда науки.

1. R. Yu, W. Zhang, H.-J. Zhang, S.-C. Zhang, X. Dai, and Z. Fang, Science **329**, 61 (2010).
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. D. Zhang, M. Shi, T. Zhu, D. Xing, H. Zhang, and J. Wang, Phys. Rev. Lett. **122**, 206401 (2019).
5. M. M. Otrokov, I. I. Klimovskikh, H. Bentmann et al. (Collaboration), Nature **576**, 416 (2019).
6. J. Li, Y. Li, S. Du, Z. Wang, B.-L. Gu, S.-C. Zhang, K. He, W. Duan, and Y. Xu, Sci. Adv. **5**, eaaw5685 (2019).
7. Y. Gong, J. Guo, J. Li et al. (Collaboration), Chinese Phys. Lett. **36**, 076801 (2019).
8. R. S. K. Mong, A. M. Essin, and J. E. Moore, Phys. Rev. B **81**, 245209 (2010).
9. D. S. Lee, T.-H. Kim, C.-H. Park, C.-Y. Chung, Y. S. Lim, W.-S. Seo, and H.-H. Park, CrystEngComm **15**, 5532 (2013).
10. Y. Li, Z. Jiang, J. Li, S. Xu, and W. Duan, Phys. Rev. B **100**, 134438 (2019).
11. B. Li, J.-Q. Yan, D. M. Pajerowski, E. Gordon, A.-M. Nedi, Y. Sizyuk, L. Ke, P. P. Orth, D. Vaknin, and R. J. McQueeney, Phys. Rev. Lett. **124**, 167204 (2020).
12. H.-P. Sun, C. M. Wang, S.-B. Zhang, R. Chen, Y. Zhao, C. Liu, Q. Liu, C. Chen, H.-Z. Lu, and X. C. Xie, Phys. Rev. B **102**, 241406 (2020).
13. M. M. Otrokov, I. P. Rusinov, M. Blanco-Rey, M. Hoffmann, A. Yu. Vyazovskaya, S. V. Eremeev, A. Ernst, P. M. Echenique, A. Arnau, and E. V. Chulkov, Phys. Rev. Lett. **122**, 107202 (2019).
14. А. М. Шикин, Д. А. Естюнин, Д. А. Глазкова, С. О. Фильнов, И. И. Климовских, Письма в ЖЭТФ **115**, 241 (2022).
15. С. А. Альтшулер, Б. М. Козырев, *Электронный парамагнитный резонанс соединений элементов переходных групп*, Наука, М. (1972).
16. K. W. H. Stewens, Proc. Phys. Soc. A **65**, 209 (1952).
17. К. Бальхаузен, *Введение в теорию поля лигандов*, Мир, М. (1964).
18. J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. A **276**, 238 (1963).
19. B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, Science **314**, 1757 (2006).
20. X. Dang, J. D. Burton, A. Kalitsov, J. P. Velev, and E. Y. Tsymbal, Phys. Rev. B. **90**, 155307 (2014).
21. В. В. Вальков, Письма в ЖЭТФ **111**, 772 (2020).
22. В. В. Вальков, Письма в ЖЭТФ **114**, 812 (2021).
23. J. Hubbard, Proc. R. Soc. A **285**, 542 (1965).
24. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **68**, 207 (1975).
25. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **70**, 1100 (1976).
26. Y. Nagaoka, Phys. Rev. **147**, 392 (1966).
27. Ю. А. Изюмов, УФН **161**(11), 1 (1991).
28. Ю. А. Изюмов, УФН **165**, 403 (1995).
29. Ю. А. Изюмов, УФН **167**, 465 (1997).
30. Н. Н. Боголюбов, Изв. Ан. СССР. Сер. физ. **VI**(1), 77 (1947).
31. Д. Н. Зубарев *Неравновесная статистическая термодинамика*, Наука, М. (1971).
32. R. Zwanzig, Phys. Rev. **124**, 983 (1961).
33. H. Mori, Prog. Theor. Phys. **33**, 423 (1965).
34. D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, Phys. Rev. Lett. **49**, 405 (1982).
35. J. K. Asboth, L. Oroszlany, and A. Palyi, *A Short Course on Topological Insulators*, The Series Lecture Notes in Physics, Springer, Heidelberg (2016), v. 919.
36. В. В. Вальков, В. А. Мицкан, А. О. Злотников, М. С. Шустин, С. В. Аксенов, Письма в ЖЭТФ **110**, 126 (2019).
37. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **123**, 325 (2003).