

# МОДИФИКАЦИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ МАГНИТНОГО ТОПОЛОГИЧЕСКОГО ИЗОЛЯТОРА $MnBi_2Te_4$ ПРИ КОНТАКТЕ СО СЛОЯМИ МАГНИТНЫХ АТОМОВ $Co$ И ТЯЖЕЛЫХ АТОМОВ $Au$

Анферова В.В.<sup>1</sup>, Шикин А.М.<sup>1</sup>, Тарасов А.В.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup> Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия  
e-mail: st085002@student.spbu.ru, тел.: 8 (961) 8035353

Магнитные топологические изоляторы (МТИ) представляют значительный интерес для исследований, поскольку сочетают в себе нетривиальную зонную топологию и магнитный порядок [1]. Благодаря этому в них проявляется ряд интересных эффектов, среди которых квантовый аномальный эффект Холла (КАЭХ) [2]. Магнитное взаимодействие в МТИ нарушает симметрию обращения времени, что приводит к открытию энергетической запрещенной зоны (ЭЗЗ) в электронной структуре топологических поверхностных состояний (ТПС) [3]. Примером такой системы является антиферромагнитный топологический изолятор (АФМ ТИ)  $MnBi_2Te_4$  [4]. Примечательно, что экспериментальные исследования электронной структуры  $MnBi_2Te_4$  показывают значительные вариации величины ЭЗЗ для различных образцов кристалла [5-6]. Эти наблюдения имеют важное значение, поскольку величина ЭЗЗ является одним из ключевых параметров, определяющих возможность наблюдения КАЭХ в системе, а значит и перспективы использования этого материала в электронных устройствах [7]. Уменьшение ЭЗЗ в экспериментальных наблюдениях может быть связано с наличием дефектов на поверхности кристалла, которые приводят к снижению магнитного и спин-орбитального взаимодействия в системе по сравнению с модельной системой [8].

Цель данной работы заключается в теоретической оценке возможности модулирования ЭЗЗ в ТПС кристалла  $MnBi_2Te_4$  путем нанесения на его поверхность магнитных атомов  $Co$  для увеличения магнетизма или тяжелых атомов  $Au$  для усиления спин-орбитального взаимодействия. Это может компенсировать уменьшение ЭЗЗ, вызванное дефектами поверхности. В исследовании также учитывались такие факторы, как конфигурация расположения нанесенных атомов и расстояние от наносимого слоя до поверхности кристалла.

В качестве метода исследования используется теория функционала плотности (ТФП), позволяющая теоретически рассчитать электронную структуру и оценить возможности контроля величины ЭЗЗ в ТПС с помощью заявленных подходов.

В работе представлены и проанализированы изменения электронной структуры  $MnBi_2Te_4$  при нанесении на его поверхность слоев  $Co$  и  $Au$ . Полученные результаты показывают, что электронная структура таких систем значительно зависит от конфигурации интерфейса, расстояния между адслоем и поверхностью, а также от концентрации наносимых атомов. Определяющим фактором является энергетическое положение зон адатомов. Расчеты, выполненные в рамках ТФП, показывают, что если энергетические уровни адатомов находятся ниже или выше точки Дирака, то ТПС сохраняются; однако, если состояния адслоя оказываются

вблизи точки Дирака, то ТПС разрушаются. Этот факт подтверждается восстановлением ТПС при смещении зон адслоя от точки Дирака под воздействием поверхностного заряда. Кроме того, в случае интерфейса  $\text{Co/MnBi}_2\text{Te}_4$  было обнаружено, что зоны  $\text{Co}$  смещаются вниз при уменьшении расстояния между адслоем и кристаллом. Для системы  $\text{Au/MnBi}_2\text{Te}_4$  наблюдается обратный эффект: зоны  $\text{Au}$  смещаются вниз при увеличении расстояния между адслоем и кристаллом. Помимо этого, для  $\text{Au/MnBi}_2\text{Te}_4$  при уменьшении расстояния отмечено увеличение ЭЗЗ до 1,5 раз.

Таким образом результаты данной работы показывают, что нанесение слоев  $\text{Co}$  и  $\text{Au}$  может приводить к изменению величины ЭЗЗ, однако величина изменения и ее направление в значительной мере определяются структурой наносимого слоя.

*Работа выполнена при поддержке Санкт-Петербургского государственного университета (грант 95442847).*

1. M. Z. Hasan and C. L. Kane, Rev. Mod. Phys., 2010, 82, 3045.
2. Rui Yu и др., Science, 2010, 329.5987, 1095-9203
3. Yoshinori Tokura, Kenji Yasuda, Atsushi Tsukazaki, Nat. Rev. Phys., 2019, 1.2, 126-143.
4. М. М. Отроков и др., Nat. Rev. Phys., 2019, 576.7787, 416-422.
5. Т. П. Макарова и др., ЖЭТФ, 2023, 163.5, 708-716.
6. Т. П. Естюнина и др., Письма в ЖЭТФ, 2024, 119.6, 439-445.
7. Cui-Zu Chang, Chao-Xing Liu, and Allan H. MacDonald, Rev. Mod. Phys., 2023, 95, 011002.
8. Felix Lüpke, Marek Kolmer, Jiaqiang Yan, Hao Chang, Paolo Vilmercati, Hanno H. Weitering, Wonhee Ko, An-Ping Li, Commun. Mater., 2023, 4, 82.