

# Связанные состояния короткодействующего дефекта на поверхности собственного антиферромагнитного топологического изолятора в неколлинеарной фазе

В. Н. Меньшов<sup>ID+\*1)</sup>, Е. В. Чулков<sup>ID\*×</sup>

<sup>+</sup> Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, 123182 Москва, Россия

<sup>\*</sup> Санкт-Петербургский государственный университет, 199034 С.-Петербург, Россия

<sup>×</sup> Departamento de Polímeros y Materiales Avanzados: Física, Química y Tecnología, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad del País Vasco UPV/EHU, 20080 San Sebastian/Donostia, Basque Country, Spain

Поступила в редакцию 24 октября 2023 г.

После переработки 24 октября 2023 г.

Принята к публикации 1 ноября 2023 г.

В данной работе теоретически исследуются особенности электронных состояний на поверхности собственного антиферромагнитного топологического изолятора, содержащего дефекты. Наш подход учитывает роль электростатического потенциала и вариацию ориентации магнитных моментов в приповерхностных слоях. Описано изменение спектральных характеристик поверхностных состояний при трансформации намагниченности из равновесной антиферромагнитной фазы А-типа в ферромагнитную фазу через неколлинеарную текстуру. Показано, что в антиферромагнитном топологическом изоляторе с одноосной анизотропией, внешнее магнитное поле, приложенное вдоль легкой оси, может вызвать значительную модуляцию величины обменной щели в спектре поверхностных состояний и даже инвертировать ее знак. Моделируя влияние уединенного дефекта как возмущение поверхностного потенциала на конечном масштабе, мы аналитически исследуем формирование связанного состояния и его поведение в зависимости от силы потенциального и обменного рассеяния на дефекте и ширины обменной щели. Продемонстрировано, что энергетический уровень связанного состояния испытывает резкий сдвиг в окрестности спин-флоп перехода. Полученные теоретические результаты позволяют дать последовательное объяснение недавних экспериментальных данных по сканирующей туннельной спектроскопии антиузельных дефектов на поверхности прототипного антиферромагнитного топологического изолятора  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  во внешнем магнитном поле.

DOI: 10.31857/S1234567823230088, EDN: aarfrp

**Введение.** Исследования недавно открытого антиферромагнитного (АФМ) топологического изолятора (ТИ)  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  [1] – первого в ряду материалов, сочетающих собственный магнитный порядок и нетривиальную топологию электронной зонной структуры – значительно продвинуло и обогатило наше представление о квантовых эффектах в твердом теле [2–7]. Кристаллическая структура этого уникального материала представляет последовательность семислойных блоков (СБ) Те-Ві-Те-Мп-Те-Ві-Те. В основном состоянии  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  магнитные моменты на атомах марганца выстраиваются в дальний АФМ порядок А-типа [1]. Комбинация симметрии относительно обращения времени и трансляционной симметрии магнитной решетки позволяет классифицировать  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  как топологически

нетривиальный материал с трехмерным инвариантом  $Z_2 = 1$  [8]. Нарушение комбинированной симметрии на поверхности (0001)  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  должно приводить к открытию энергетической щели в спектре топологического электронного состояния. Совместимость собственного магнитного порядка с зонной топологией в  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  служит основой для реализации целого ряда явлений в тонких пленках данного материала, таких как квантовый аномальный эффект Холла (КАЭХ) [4, 5], фаза аксионного изолятора (АИ) [6] и другие эффекты, потенциально важные с точки зрения спинтронных приложений [2–7]. Более того, в пленках с четным числом СБ, помещенных во внешнем магнитном поле, наблюдается переход из состояния АИ в состояние КАЭХ [9, 10].

Важнейшей предпосылкой для достижения режима квантованной проводимости является наличие в поверхностном спектре топологических состояний

<sup>1)</sup>e-mail: vnmenshov@mail.ru

обменной щели, в пределах которой фиксируется химический потенциал [2]. Расчеты из первых принципов предсказывают довольно значительную величину щели до 88 мэВ [1]. Однако фотоэмиссионные (ARPES) измерения спектров поверхностных состояний в  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  дают противоречивые результаты. Одни группы наблюдают в поверхностной электронной структуре щель, хотя и разной величины в диапазоне несколько десятков мэВ [11–13], другие – бесщелевое состояние [14–18]. Многие исследователи склоняются к тому мнению, что модуляция обменной щели в широких пределах связана со структурным несовершенством поверхностной области исследуемых образцов  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  [11–13, 19, 20]. Согласно экспериментальным и теоретическим данным [21–23] в этом материале присутствуют антиузельные дефекты: атомы Mn, занимающие узлы в слоях Bi ( $\text{Mn}_{\text{Bi}}$ ), и атомы Bi, замещающие атомы Mn ( $\text{Bi}_{\text{Mn}}$ ) в середине СБ. В такой парадигме уменьшение величины щели или ее отсутствие может быть связано с ростом концентрации дефектов  $\text{Bi}_{\text{Mn}}$  и  $\text{Mn}_{\text{Bi}}$  [11, 20, 24], что определяется условиями приготовления образцов.

Другая специфическая черта АФМ ТИ типа  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  состоит в сравнительно слабой АФМ связи между ферромагнитными (ФМ) слоями соседних СБ и не сильно выраженной магнито-кристаллической анизотропии вдоль легкой оси, перпендикулярной базисной плоскости (0001). Поэтому внешнее магнитное поле умеренной величины  $H < 5$  Тл способно перестроить магнитный порядок, часто провоцируя формирование сложных неколлинеарных текстур как на поверхности толстых образцов [25], так и в тонких пленках [26–30]. Изучая в пленках  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  толщиной от 4 до 8 СБ топологический переход во внешнем поле между режимами КАЭХ и АИ, авторы [10] обнаружили инверсию спектральной щели в области неколлинеарной фазы. В [31] отмечается усиление флуктуаций магнитосопротивления в тонких пленках  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  при метамагнитном переходе между АФМ фазой и фазой со скошенным (*canted*) АФМ порядком. В недавней работе [32] посредством сканирующей туннельной микроскопии и спектроскопии показано существование связанных состояний электронов на антиузельных дефектах  $\text{Mn}_{\text{Bi}}$  в приповерхностном СБ  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ . Примечательно, в процессе перемагничивания образцов локальная плотность состояний вблизи дефекта  $\text{Mn}_{\text{Bi}}$  резко меняется, когда магнитные моменты испытывают спин-флоп переход.

Понимание поведения топологических электронных состояний в обменном поле со сложной ориентационной и пространственной конфигурацией явля-

ется актуальной темой, которая развивалась в ряде теоретических исследований. В статьях [33, 34] были подробно описаны состояния, индуцированные на поверхности ТИ коллинеарными магнитными доменными стенками с различной текстурой. В [35] изучение связанных состояний было обобщено на случай неколлинеарных доменных стенок. Вопрос о спектральных свойствах поверхностных и краевых состояний, а также состояний на доменных стенках, в пленке собственного АФМ ТИ, подверженной переходу из режима АИ в режим КАЭХ, рассматривался в работе [36]. В настоящей статье мы аналитически изучаем поведение связанных состояний, формирующихся вблизи короткодействующего магнитного дефекта на поверхности АФМ ТИ, испытывающего трансформацию из АФМ фазы в ФМ фазу под влиянием внешнего магнитного поля. Такая задача весьма актуальна, поскольку объединяет два принципиальных для электронных свойств АФМ ТИ типа  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  аспекта – неколлинеарную намагниченность и собственные дефекты.

**Модель для поверхностных состояний собственного АФМ ТИ.** Кристаллическая структура соединения  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  вдоль направления роста  $e_z$  формируется из СБ  $\text{Te}(1)$ - $\text{Bi}(1)$ - $\text{Te}(2)$ - $\text{Mn}$ - $\text{Te}(3)$ - $\text{Bi}(2)$ - $\text{Te}(4)$ , между которыми действуют слабые ван-дер-ваальсовские силы. Топологические свойства определяются четырьмя низкоэнергетическими состояниями, сформированными из  $p_z$ -орбиталей атомов во внешних слоях СБ: связывающими  $|\text{Bi}(1, 2), \sigma\rangle$  и антисвязывающими  $|\text{Te}(1, 4), \sigma\rangle$ , комбинациями, где индекс  $\sigma = \uparrow\downarrow$  обозначает проекцию спина на ось квантования  $e_z$ . Матричный элемент  $A$  оператора скорости перемешивает состояния с противоположной четностью и проекцией спина. В базисе  $u_\Gamma$ , сформированном из этих четырех состояний, в окрестности  $\Gamma$  точки зоны Бриллюэна  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  гамильтониан принимает вид [37]:

$$H_t(\mathbf{k}) = (\Xi - Bk^2)\tau_z \otimes \sigma_0 + A\tau_x \otimes (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}), \quad (1)$$

где  $\sigma_\alpha$  и  $\tau_\beta$  ( $\alpha, \beta = 0, x, y, z$ ) обозначают матрицы Паули в спиновом и орбитальном пространстве, соответственно,  $\Xi$  и  $B$  определяют энергетическую щель и кривизну зон в спектре объемных состояний при  $\mathbf{k} = 0$ . Мы используем изотропную версию модели, удерживая квадратичные по импульсу  $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$  слагаемые. При достаточно большой спин-орбитальной связи энергетические уровни состояний  $|\text{Bi}(1, 2), \sigma\rangle$  и  $|\text{Te}(1, 4), \sigma\rangle$  инвертированы вблизи  $\Gamma$  точки, что выражается условием  $\Xi B > 0$ , соответствующим нетривиальному инварианту  $Z_2 = 1$ .

Во внутренних слоях Те2-Мn-Те3 каждого СБ благодаря суперобменной связи моменты на  $3d$ -атомах выстраиваются ферромагнитным (ФМ) образом. Намагниченности  $\mathbf{m}^{(n)}$  в соседних СБ направлены антипараллельно друг к другу:  $\mathbf{m}^{(n)} = -\mathbf{m}^{(n\pm 1)}$ ,  $n$  – индекс СБ. Дальний АФМ порядок А-типа с поляризацией, ортогональной базисной плоскости  $(x, y)$ ,  $\mathbf{m}^{(n)} = (0, 0, m_z^{(n)})$ ,  $m_z^{(n)} \sim (-1)^n$ , наблюдается в объеме  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  ниже температуры Нееля  $T_N \approx 24 \text{ K}$  [1]. В известных АФМ ТИ энергия магнито-кристаллической анизотропии относительно невелика, поэтому внешнее магнитное поле умеренной величины способно переориентировать магнитные моменты относительно легкой оси  $\mathbf{e}_z$ , провоцируя подчас формирование сложных неколлинеарных текстур [25]. Будем рассматривать только однородные в плоскости  $(x, y)$  конфигурации намагниченности, где компоненты  $\mathbf{m}^{(n)} = (m_x^{(n)}, m_y^{(n)}, m_z^{(n)})$  меняются от одного СБ к другому. В дополнение к гамильтониану (1) мы вводим магнитное слагаемое  $H_{ex}$ , как сумму обменных энергий всех СБ в базе  $u\Gamma$ :

$$H_{ex}(z) = c \sum_n \begin{pmatrix} M_z^{(n)} & M_{\pm}^{(n)} \\ M_{\pm}^{(n)} & -M_z^{(n)} \end{pmatrix} \delta(z - z_n), \quad (2)$$

где  $M_z^{(n)} = \text{diag}(J_1, J_2)m_z^{(n)}$ ,  $M_{\pm}^{(n)} = \text{diag}(J_3, J_4)m_{\pm}^{(n)}$ ,  $m_{\pm}^{(n)} = m_x^{(n)} \pm im_y^{(n)}$ ,  $\delta(z)$  – дельта-функция,  $z$  – пространственная координата вдоль направления роста слоев. Обменный потенциал считаем локализованным в середине  $n$ -го СБ при  $z_n = nc - z_0$ ,  $c$  – толщина СБ. Кроме того, в дальнейшем подразумеваем, что амплитуда намагниченности включена в матричные элементы обменных интегралов  $J_{1,2,3,4}$  и фиксирована,  $|\mathbf{m}^{(n)}| = 1$ . Таким образом, вектор  $\mathbf{m}^{(n)}$  определяет только ориентацию моментов в  $n$ -м СБ.

Рассмотрим образец собственного АФМ ТИ, занимающий трехмерное полупространство  $z > 0$ . Учитывая, что топологические электроны, определенные в (1), помимо обменного поля (2) подвержены действию электростатического поверхностного потенциала (ПП)  $H_b(\mathbf{r})$  [20, 38, 39], запишем полный функционал электронной энергии в виде:

$$\Omega = \int d\mathbf{r} \Theta^+(\mathbf{r}) [H_t(-i\nabla) + H_b(\mathbf{r}) + H_{ex}(z)] h(z) \Theta(\mathbf{r}), \quad (3)$$

где спинорные огибающие функции  $\Theta(\mathbf{r})$  описывают низкоэнергетические состояния,  $h(z)$  – функция Хевисайда,  $\mathbf{r} = (x, y, z)$ . Предполагая, что ПП локализован вблизи границы образца с характерной длиной  $\sim d$ , которая значительно короче пространственного масштаба затухания огибающей волновой функции

$\Theta(\mathbf{r}) \sim \exp(-qz)$ ,  $dq \ll 1$ , можно использовать аппроксимацию,  $H_b(\mathbf{r}) = U(x, y)d\delta(z)$ . Пространственные вариации ПП вдоль поверхности мы связываем с флуктуациями концентрации антиузельных дефектов [20, 24]. Кроме того, матрицу ПП представим в диагональной форме  $U = \text{diag}\{U_1, U_2, U_3\}$ . Суммирование в  $H_{ex}(z)$  (2) проводится по индексу СБ  $n = 1, 2, 3, \dots$ , где отсчет начинается от выходящего на поверхность СБ. Полагаем  $z_0 = c/2$ , так что ближайший к поверхности ФМ слой находится на расстоянии  $z = z_1 = c/2$  от нее.

**Поверхностные состояния АФМ ТИ с неколлинеарной текстурой намагниченности.** Сначала обсудим ситуацию с бесконечной и однородной в плоскости  $(x, y)$  поверхностью, другими словами, поверхностью с усредненным ПП  $U = \langle U(x, y) \rangle = \text{const}$ . В таком случае, варьируя функционал (3), мы приходим к одномерной граничной задаче:

$$[H_t(\boldsymbol{\kappa}, -i\partial_z) + H_{ex}(z) - E]\Theta(\boldsymbol{\kappa}, z) = 0, \quad (4)$$

$$\left[ \frac{\delta H_t(\boldsymbol{\kappa}, -i\partial_z)}{\delta(-i\partial_z)} - 2dU \right] \Theta(\boldsymbol{\kappa}, z) = 0, \quad (5)$$

где импульс  $\boldsymbol{\kappa} = (k_x, k_y)$  играет роль параметра,  $\partial_z = \partial/\partial z$ . Нас интересуют собственные состояния задачи (4)–(5), затухающие вдали от поверхности,  $\Theta(\boldsymbol{\kappa}, z \rightarrow \infty) = 0$  и имеющие энергию внутри объемной запрещенной зоны,  $E_S(\boldsymbol{\kappa}) < \Xi$ . В общем случае вряд ли можно найти точное решение этой задачи. Поэтому мы применим процедуру теории возмущений на редуцированном базисе [20, 38, 39], которая позволяет исходную трехмерную модель АФМ ТИ в полупространстве свести к эффективному двумерному гамильтониану  $H_S(\boldsymbol{\kappa})$ . Подробности процедуры изложены в [20]. Здесь выделим основные моменты.

В отсутствии обменного поля,  $H_{ex}(z) = 0$ , уравнения (4)–(5) допускают точное решение при  $\boldsymbol{\kappa} = 0$ . Чтобы упростить вычисления, мы выберем следующее соотношение между матричными элементами ПП:  $U_1 = -U_2 = U$  [20]. В таком случае легко определить энергию,  $E_0 = 0$ , и огибающую волновой функции,  $\Theta_0(z) = (1, i, 1, -i)^t \theta_0(z)$ , где  $t$  означает операцию транспонирования. Пространственный профиль поверхностного состояния

$$\theta_0(z) = D \left[ \exp(-q_1 z) + \frac{\sqrt{\lambda - 1} - \tilde{U}}{\sqrt{\lambda - 1} + \tilde{U}} \exp(-q_2 z) \right] \quad (6)$$

существенно зависит от величины и знака ПП, где  $\tilde{U} = \frac{dq_0 U}{\Xi}$ ,  $q_0 = \sqrt{\frac{\Xi}{B}}$ ,  $\lambda = \frac{A^2}{4B\Xi}$ . В свою очередь, мас-

штаб спада огибающей  $\sim q_{1,2}^{-1}$  определяется параметрами гамильтониана (1) как  $q_{1,2} = q_0[\sqrt{\lambda} \pm \sqrt{\lambda - 1}]$ . Нормировочная константа  $D$  удовлетворяет условию  $2 \int_0^\infty dz \theta_0^2(z) = 1$ . Не ограничивая общность рассмотрения, далее остановимся на случае  $\lambda > 1$ .

Несложно убедиться, что пара спиноров  $\Phi^\uparrow(z) = (1, i, 0, 0)^t \theta_0(z)$  и  $\Phi^\downarrow(z) = (0, 0, 1, -i)^t \theta_0(z)$  составляет ортонормированный базис [20]. Рассчитывая в этом базисе матричные элементы для возмущения  $\sim H_{ex}$  и  $\sim \kappa$ , получаем поверхностный гамильтониан

$$H_S(\kappa) = A(k_x \sigma_y - k_y \sigma_x) + J_{\parallel}(Q_x \sigma_x + Q_y \sigma_y) + J_z Q_z \sigma_z, \quad (7)$$

где введены продольный  $Q_{x,y}$  и поперечный  $Q_z$   $Q$ -факторы

$$Q_{x,y,z} = 2c \sum_{n=1}^{\infty} m_{x,y,z}^{(n)} \theta_0^2(z_n), \quad (8)$$

$J_z = \frac{J_1 + J_2}{2}$ ,  $J_{\parallel} = \frac{J_3 - J_4}{2}$ . Отвечающий гамильтониану (7) поверхностный спектр  $E_S^{\pm}(\kappa) = \pm \sqrt{J_z^2 Q_z^2 + (A k_y - J_{\parallel} Q_x)^2 + (A k_x + J_{\parallel} Q_y)^2}$  имеет форму дираковского конуса, который смещен из центра зоны Бриллюэна на волновой вектор  $\kappa_0 = \frac{J_{\parallel}}{A}(-Q_y, Q_x)$  и имеет в точке  $\kappa = \kappa_0$  энергетическую щель  $2\Delta = 2J_z Q_z$ . Щель  $2\Delta$  и смещение  $\kappa_0$  имеют обменную природу, однако их величина и знак определяются электростатическими условиями на поверхности АФМ ТИ согласно явной функциональной зависимости огибающей (6) от силы ПП  $U$ . Отметим, что  $2\Delta$  и  $\kappa_0$  прямо связаны с ориентацией намагниченности в СБ,  $\mathbf{m}^{(n)}$ , которая может меняться во внешнем магнитном поле.

Для прототипного АФМ ТИ  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  глубина проникновения волновой функции топологического поверхностного состояния внутрь объема материала,  $\sim q_{1,2}^{-1}$ , составляет один-два примыкающих к поверхности СБ [11, 12, 19]. Принимая во внимание этот факт, можно оборвать суммирование по  $n$  в (8), удержав первые два члена ряда. Вклад последующих СБ с  $n \geq 3$  является пренебрежимо малым в силу экспоненциальной зависимости (6). Полагая для определенности  $m_y^{(n)} = 0$  и вводя азимутальный угол  $\vartheta_n$  так, что  $m_x^{(n)} = \sin \vartheta_n$  и  $m_z^{(n)} = \cos \vartheta_n$ , перепишем уравнение (8) в редуцированном виде:

$$Q_{x,z}(\vartheta_1, \vartheta_2) = \quad (9)$$

$$= 2c \left[ \left\{ \begin{array}{c} \sin \vartheta_1 \\ \cos \vartheta_1 \end{array} \right\} \theta_0^2\left(\frac{c}{2}\right) + \left\{ \begin{array}{c} \sin \vartheta_2 \\ \cos \vartheta_2 \end{array} \right\} \theta_0^2\left(\frac{3c}{2}\right) \right],$$

где верхняя строка дает ориентационную зависимость продольного  $Q$ -фактора, нижняя – поперечного. С физической точки зрения уравнение (9) корректно описывает, как спиновая степень свободы поверхностного состояния АФМ ТИ откликается на отклонение намагниченности от коллинеарной конфигурации. Каждой паре углов  $\vartheta_1$  и  $\vartheta_2$  соответствует энергетическая обменная щель  $2\Delta = 2J_z Q_z(\vartheta_1, \vartheta_2)$  и импульсное обменное смещение  $\kappa_0 = \mathbf{e}_y \frac{J_{\parallel}}{A} Q_x(\vartheta_1, \vartheta_2)$  в спектре поверхностных состояний  $E_S^{\pm}(\kappa)$ .

Внешнее магнитное поле  $\mathbf{H}$  сравнительно малой амплитуды, направленное вдоль легкой оси намагничивания АФМ ТИ, слабо искажает полностью компенсированную коллинеарную текстуру А-типа, свойственную основному состоянию. С ростом поля при критическом значении  $H = H_f$  происходит спин-флоп переход с резким поворотом моментов в подрешетках. Затем моменты постепенно ориентируются вдоль направления  $\mathbf{H}$  и окончательно выстраиваются строго параллельно при достижении поля насыщения  $H_s$ . Если же  $\mathbf{H}$  направлено перпендикулярно легкой оси, моменты в подрешетках изменяют ориентацию от АФМ к ФМ постепенно с ростом поля во всем диапазоне от 0 до  $H_s$ . Такое поведение  $\mathbf{m}^{(n)}(\mathbf{H})$  экспериментально зарегистрировано как в  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  с легкой осью  $\mathbf{e}_z$  [28, 30, 32, 40, 41], так и в планарном АФМ  $\text{EuIn}_2\text{As}_2$ , который обладает легкой плоскостью  $(x, y)$  и поэтому рассматривается в качестве кандидата в АИ [42].

На рисунке 1 представлена зависимость поперечного  $Q$ -фактора от ориентации моментов в поверхностных СБ,  $Q_z(\vartheta_1, \vartheta_2)$ , для частного случая с характерными значениями параметров  $\tilde{U} = -1$ ,  $\lambda = 1.1$  и  $c = 1$ . С ростом поля  $\mathbf{H}$  магнитная подсистема АФМ ТИ трансформируется из равновесного состояния при  $H = 0$  в строго ФМ состояние при  $H \geq H_s$ , проходя через последовательность неколлинеарных текстур  $\{\vartheta_1(H), \vartheta_2(H)\}$ . Оптимальная траектория такого перехода,  $\{\vartheta_1(H), \vartheta_2(H)\}_O$ , определяется минимумом энергии магнитной подсистемы в пространстве возможных конфигураций. Зная оптимальную траекторию, можно оценить зависимость щели от внешнего поля,  $2\Delta(H)$ .

Рассмотрим подробно наиболее интересный случай, когда АФМ ТИ с одноосной анизотропией помещен во внешнее поле  $\mathbf{H} = H\mathbf{e}_z$ . Измерения намагниченности в образцах  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  [28, 30, 32, 40, 41, 43] показывают резкий спин-флоп переход при  $H = H_f$ . Микромагнитные симуляции для пленок  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ , выполненные в работах [28, 32], воспроизводят в интервале  $H_f < H < H_s$  магнитную фазу со скошенной текстурой моментов подрешеток, для кото-

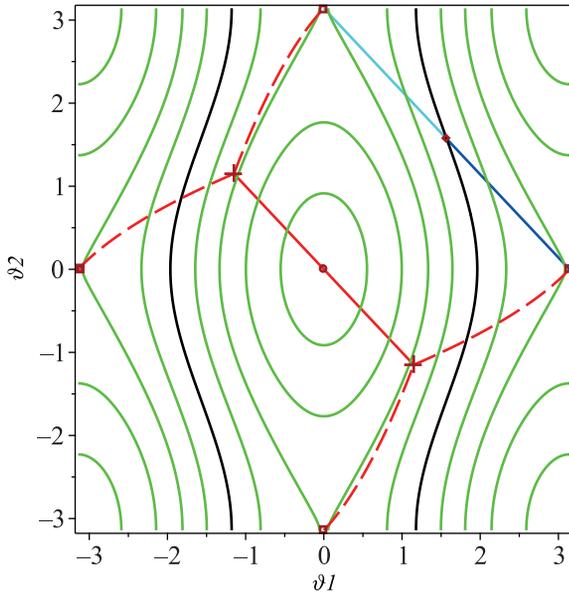


Рис. 1. (Цветной онлайн) Зависимость поперечного  $Q$ -фактора от ориентации намагниченности в приповерхностных СБ собственного АФМ ТИ с одноосной анизотропией, представленная эквидистантными контурными линиями, вдоль которых  $Q_z(\vartheta_1, \vartheta_2)$  принимает постоянные значения: 0 (черные кривые),  $\pm 0.2$ ,  $\pm 0.4$ ,  $\pm 0.6$ ,  $\pm 0.8$  (зеленые кривые). Функция  $Q_z(\vartheta_1, \vartheta_2)$  монотонно возрастает с уменьшением  $|\vartheta_{1,2}|$  и достигает максимума в ФМ фазе при  $\vartheta_{1,2} = 0$ . Четыре оптимальных траектории  $\{\vartheta_1(H), \vartheta_2(H)\}_O$  перехода из АФМ фазы в ФМ фазу с ростом поля  $\mathbf{H} = H\mathbf{e}_z$  ( $H > 0$ ) изображены красным цветом: непрерывная прямая линия  $\vartheta_1 = -\vartheta_2$  соответствует САФМ конфигурации, существующей в интервале  $H_f < H < H_s$ ; пунктирные линии качественно изображают изменение текстуры намагниченности в слабом поле  $H < H_f$ ; крестиками обозначены точки спин-флоп перехода. Две оптимальных траектории перехода из АФМ фазы в ФМ фазу с  $\vartheta_1 = \vartheta_2 = \frac{\pi}{2}$  в поле  $\mathbf{H} = H\mathbf{e}_x$  ( $H > 0$ ) представлены голубой и синей прямыми. Использованы безразмерные параметры:  $\tilde{U} = \frac{dU}{\sqrt{B\Xi}} = -1$ ,  $\tilde{c} = c\sqrt{\frac{\Xi}{B}} = 1$  и  $\lambda = 1.1$

рой будем использовать аббревиатуру САФМ. Такая текстура обладает нескомпенсированной поляризацией вдоль внешнего поля, достигающей насыщения при  $H = H_s$ . В нашем подходе ее можно описать как  $\vartheta_1(H) = -\vartheta_2(H)$ , где  $|\sin \vartheta_1(H)| \sim H_s - H$ . На рисунке 2 представлена зависимость поперечного  $Q$ -фактора от силы ПП,  $Q_z(U)$ , для различных значений угла  $\vartheta_1$ , который задает отклонение моментов от направления внешнего поля в САФМ фазе. Можно видеть, что щель,  $2\Delta(H)$ , заметно возрастает с уменьшением угла  $\vartheta_1$ , хотя при этом она может быть как больше, так и меньше амплитуды равновесной щели  $2|\Delta(H = 0)|$ . В свою очередь послед-

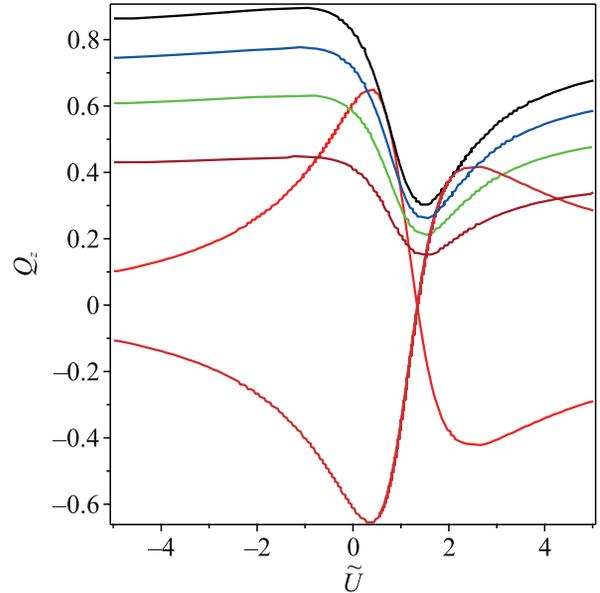


Рис. 2. (Цветной онлайн) Эволюция поперечного  $Q$ -фактора для АФМ ТИ с одноосной анизотропией при вариации неколлинеарной текстуры намагниченности от АФМ фазы до полностью насыщенной ФМ фазы. Угол  $\vartheta_1$  для скошенной магнитной текстуры принимает значения  $\frac{\pi}{3}$  (коричневая линия),  $\frac{\pi}{4}$  (зеленая),  $\frac{\pi}{6}$  (синяя) при фиксированных параметрах:  $\lambda = 1.1$  и  $\tilde{c} = c\sqrt{\frac{\Xi}{B}} = 1$ . Намагниченность в примыкающем к поверхности СБ ( $c = n = 1$ ) в основном состоянии направлена параллельно,  $m_z^{(1)} = 1$  (красная линия), или антипараллельно,  $m_z^{(1)} = -1$  (оранжевая), приложенному внешнему полю  $\mathbf{H} = H\mathbf{e}_z$  ( $H > 0$ ). Вдоль горизонтальной оси отложена безразмерная переменная  $\tilde{U} = \frac{dU}{\sqrt{B\Xi}}$

няя,  $2\Delta(H = 0)$ , меняет знак при критической силе ПП  $U = U_0$  ( $\tilde{U}_0 \approx 1.37$  при заданных параметрах на рис. 2), т.е.  $Q_z(U_0)$ . Таким образом, стартуя из основного АФМ состояния  $\{\vartheta_1 = 0, \vartheta_2 = \pm\pi\}$ , если  $U > U_0$  (или  $\{\vartheta_1 = \pm\pi, \vartheta_2 = 0\}$ , если  $U < U_0$ ), в области слабых полей при некотором значении  $H_t^{(1)} < H_f^{(1)}$  (или  $H_t^{(2)} < H_f^{(2)}$ ), система пройдет через неколлинеарную конфигурацию  $\{\vartheta_1(H_t^{(1)}), \vartheta_2(H_t^{(1)})\}_O$  (или  $\{\vartheta_1(H_t^{(2)}), \vartheta_2(H_t^{(2)})\}_O$ ), которой отвечает бесщелевое состояние поверхностных электронов с  $\Delta(H_t^{(1)}) = 0$  (или  $\Delta(H_t^{(2)}) = 0$ ). Очевидно,  $H_f^{(1)} \neq H_f^{(2)}$  и  $H_t^{(1)} \neq H_t^{(2)}$ . Другими словами, когда в основном состоянии АФМ ТИ моменты на поверхности с  $U > U_0$  параллельны внешнему полю,  $\mathbf{m}^{(1)}(H = 0) \uparrow\uparrow \mathbf{H}$ , или когда  $U < U_0$  и моменты антипараллельны полю,  $\mathbf{m}^{(1)}(H = 0) \downarrow\uparrow \mathbf{H}$ , может наблюдаться поверхностный топологический переход, при котором число Черна, имеющее в рамках гамильтони-

на  $H_S(\boldsymbol{\kappa})$  (7) вид  $C = \text{sgn}(\Delta)/2$ , совершает квантовый скачок единичной величины. Действительно, на рис. 1 из четырех оптимальных траекторий две пересекают линию  $Q_z = 0$  между АФМ и САФМ фазами (эта часть траекторий показана пунктирными линиями). Точное определение критических значений  $H_f^{(1,2)}$  и  $H_t^{(1,2)}$ , а также конфигурации  $\{\vartheta_1(H_t^{(1,2)}), \vartheta_2(H_t^{(1,2)})\}_O$  является отдельной сложной задачей. Заметим, что благодаря вырождению по энергии допустима пара зеркально-симметричных относительно оси  $\mathbf{e}_z$  траекторий, соответствующих текстурам  $\{\vartheta_1(H), \vartheta_2(H)\}_O$  и  $\{-\vartheta_1(H), -\vartheta_2(H)\}_O$ . На доменной стенке, разделяющей такие текстуры, возможно формирование связанных состояний поверхностных электронов [35, 36].

Теперь рассмотрим ситуацию, когда планарный АФМ ТИ помещен в поле  $\mathbf{H} = H\mathbf{e}_x$ . В основном состоянии, когда  $\vartheta_1 = -\vartheta_2 = \pm\pi/2$ , а также в коллинеарном ФМ состоянии, когда  $\vartheta_1 = \vartheta_2 = \pi/2$ , обменная щель отсутствует,  $\Delta = 0$ . Однако, внешнее поле в интервале  $0 < H < H_s$  провоцирует формирование неколлинеарной конфигурации с выходом магнитных моментов из базисной плоскости  $(x, y)$  и, соответственно, открывает спектральную щель конечной величины  $2|\Delta(H)|$ . В результате спин-флоп перехода в интервале  $H_f < H < H_s$  возникает САФМ фаза, в которой намагниченность можно описать как  $\vartheta_2(H) = \pi - \vartheta_1(H)$ , где  $|\cos \vartheta_1(H)| \sim H_s - H$ . Используя такую связь между углами, мы описываем на рис. 3 зависимость  $Q_z(U)$  для скошенной текстуры намагниченности при различных значениях угла  $\vartheta_1$ . Как видим, размер обменной щели  $2|\Delta(H)|$  падает с полем, но в зависимости от силы ПП может менять знак. Заметим также, что существуют две оптимальных траектории с текстурами  $\{\vartheta_1(H), \pi - \vartheta_2(H)\}_O$  и  $\{\pi - \vartheta_1(H), \vartheta_2(H)\}_O$ , зеркально-симметричными относительно оси  $\mathbf{e}_x$ .

Поведение  $Q$ -фактора с силой ПП в фазе с САФМ порядком, возникающем при  $0 < H < H_s$  в случае, когда одноосный АФМ ТИ помещен в поле  $\mathbf{H} = H\mathbf{e}_x$  (оптимальные траектории показаны на рис. 1), или когда планарный АФМ ТИ помещен в поле  $\mathbf{H} = H\mathbf{e}_z$ , легко понять из рис. 3 или 2, соответственно. Также несложно оценить импульсное смещение спектра  $E_S^\pm(\boldsymbol{\kappa})$  как функцию силы ПП,  $\boldsymbol{\kappa}_0(U)$ , если обратить внимание, что согласно уравнению (9)  $Q_x(\vartheta_1, \vartheta_2) = Q_z(\vartheta_1 - \pi/2, \vartheta_2 - \pi/2)$ .

**Короткодействующий дефект на поверхности АФМ ТИ с неколлинеарной текстурой намагниченности.** Перейдем к изучению вопроса, как дефект формирует связанное электронное состояние

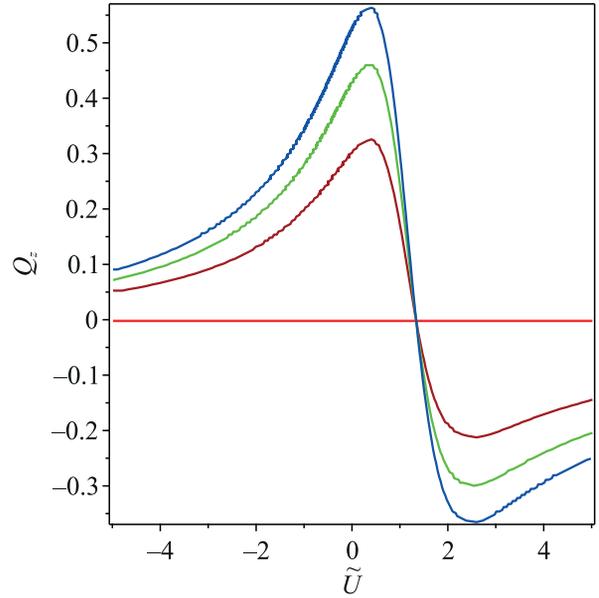


Рис. 3. (Цветной онлайн) Эволюция поперечного  $Q$ -фактора для АФМ ТИ с анизотропией в базисной плоскости при вариации неколлинеарной текстуры намагниченности от АФМ фазы до полностью насыщенной ФМ фазы. Угол  $\vartheta_1$  для скошенной магнитной текстуры принимает значения  $\frac{\pi}{3}$  (коричневая линия),  $\frac{\pi}{4}$  (зеленая),  $\frac{\pi}{6}$  (синяя) при фиксированных параметрах:  $\lambda = 1.1$  и  $\tilde{c} = c\sqrt{\frac{\Xi}{B}} = 1$ . Как в АФМ, так и в ФМ фазе  $Q_z = 0$  (красная горизонтальная линия). Вдоль горизонтальной оси отложена безразмерная переменная  $\tilde{U} = \frac{dU}{\sqrt{B\Xi}}$

на поверхности АФМ ТИ с неколлинеарной текстурой намагниченности. Для этого необходимо решить уравнение

$$\left[ H_S \left( k_x \rightarrow -i \frac{\partial}{\partial x}, k_y \rightarrow -i \frac{\partial}{\partial y} \right) + H_D(\boldsymbol{\rho}) \right] \times \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = E_D \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix}, \quad (10)$$

где в дополнение к поверхностному гамильтониану  $H_S(\boldsymbol{\kappa})$  (7) введено слагаемое  $H_D(\boldsymbol{\rho})$ , описывающее возмущение ПП, порождаемое дефектом в малой окрестности точки  $\boldsymbol{\rho}(x, y) = 0$ . Решение уравнения (10) для спинорной функции  $f_1(\boldsymbol{\rho}), f_2(\boldsymbol{\rho})^t$  обязано затухать вдали от дефекта,  $f_{1,2}(\boldsymbol{\rho}) \rightarrow 0$  при  $\rho \rightarrow \infty$ . Соответствующий энергетический уровень  $E_D$  должен лежать внутри обменной щели,  $|E_D| < |\Delta|$ .

Чтобы адекватно учесть присутствие в поверхностной области АФМ ТИ  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  антиузельного дефекта  $\text{Mn}_{\text{Bi}}$  или  $\text{Bi}_{\text{Mn}}$ , которое связано с перераспределением зарядовой и спиновой плотности, мы

моделируем взаимодействие топологических электронов с дефектом в виде  $H_D(\boldsymbol{\rho}) = [v\sigma_0 + (\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{\sigma})]g(\boldsymbol{\rho})$ . Это взаимодействие предполагается изотропным в плоскости  $(x, y)$ ,  $g(\boldsymbol{\rho}) = g(\rho)$ . Компонента  $\sim v$  связана с потенциальным рассеянием электрона на уединенном дефекте. Другая компонента, зависящая от спина, подразумевает наличие магнитного момента  $\boldsymbol{\mu} = (\mu_x, \mu_y, \mu_z)$ , причем сила обменной связи с дефектом учтена в величине  $\mu = |\boldsymbol{\mu}|$ . Специфика нашего рассмотрения состоит в сохранении конечного радиуса  $\rho_0$  действия дефекта [44, 45]. В двумерной системе силы потенциала, который моделируется с помощью дельта-функции (т.е., когда  $\rho_0 \rightarrow 0$ ), оказывается недостаточно, чтобы связать частицу. Следуя [44, 45], для пространственного распределения возмущения мы используем гауссиан  $g(\rho) = \exp\left(-\frac{\rho^2}{\rho_0^2}\right)$ .

Предполагаем, что масштаб изменения связанного состояния значительно превосходит радиус взаимодействия  $\rho_0$ . В рамках принятых допущений получаем в явном виде (громоздкие выкладки опускаем) огибающую волновой функции вне области действия дефекта, т.е. когда  $\rho > \rho_0$ :

$$f_{1,2}(\boldsymbol{\rho}) = \frac{\rho_0^2}{2A^2} \left\{ [(E_D \pm \Delta)(v \pm \mu_z)K_0(P) + i\sqrt{\Delta^2 - E_D^2}K_1(P)e^{\pm i\eta}\mu_{\pm}] f_{1,2}(0) + [(E_D \pm \Delta)\mu_{\mp}K_0(P) + i\sqrt{\Delta^2 - E_D^2}K_1(P)e^{\pm i\eta}(v \mp \mu_z)] \times f_{2,1}(0) \right\} \exp(i\kappa_0 y), \quad (11)$$

где верхний знак  $+$  или  $-$  в правой стороне уравнения коррелирует с компонентой спинора  $f_1$  или  $f_2$ , соответственно;  $K_0(P)$  и  $K_1(P)$  – модифицированная функция Бесселя нулевого и первого порядка [46] от безразмерного аргумента  $P = \frac{\rho\sqrt{\Delta^2 - E_D^2}}{A}$ ,  $\kappa_0 = \frac{J_{\parallel}Q_x}{A}$  (здесь имеется в виду, что  $Q_y = 0$ ),  $\mu_{\pm} = \mu_x \pm i\mu_y$ ,  $\tan \eta = x/y$ . Функция  $f_{1,2}(\boldsymbol{\rho})$  испытывает в плоскости  $(x, y)$  осцилляции с периодом  $2\pi/\kappa_0$  вдоль направления, ортогонального продольной компоненте результирующего обменного поля, и затухает как  $P^{-1} \exp(-P)$  вдали от дефекта, где  $P \gg 1$ . Амплитуда огибающей на дефекте  $f_{1,2}(0)$  определяется условием нормировки, а связь между  $f_1(0)$  и  $f_2(0)$  следует из системы уравнений:

$$f_{1,2}(0) = \mp \left[ (v \pm \mu_z)f_{1,2}(0) + \mu_{\mp}f_{2,1}(0) \right] \times \frac{\Delta + E_D}{4A^2} \rho_0^2 \ln \left( \frac{\Delta^2 - E_D^2}{4A^2} \rho_0^2 \right). \quad (12)$$

Уравнения (12) записаны с учетом применимости предложенного подхода, когда выполняется условие

$\frac{\rho_0^2}{4} \frac{\Delta^2 - E_D^2}{A^2} \ll 1$ . Вытекающее из (12) секулярное уравнение определяет энергетические уровни связанных состояний  $E_D$  в зависимости от  $v$ ,  $\boldsymbol{\mu}$  и  $\Delta$ . Если магнитный момент дефекта имеет только нормальную компоненту,  $\boldsymbol{\mu} = \mathbf{e}_z \mu_z$ , система (12) распадается на два независимых уравнения. Первое из них дает решение  $f_1(\boldsymbol{\rho}) \neq 0$  и  $f_2(\boldsymbol{\rho}) = 0$  с энергией  $E_D^{(1)}$ , существующее при условии  $(v + \mu_z)\Delta > 0$ . Другое дает решение  $f_1(\boldsymbol{\rho}) = 0$  и  $f_2(\boldsymbol{\rho}) \neq 0$  с энергией  $E_D^{(2)}$ , если  $(v - \mu_z)\Delta < 0$ . Энергии  $E_D^{(1)}$  и  $E_D^{(2)}$  как функции потенциала дефекта  $v$  переходят друг в друга при инверсии относительно начала координат,  $E_D^{(2)}(v) \leftrightarrow \leftrightarrow -E_D^{(1)}(-v)$ . Для немагнитного дефекта ( $\mu_z = 0$ ) при любом  $v$  существует только одно связанное состояние внутри щели. На рисунке 4 показана зависимость  $E_D^{(1)} = E_D$  в случае  $\mu_z = 0$  при  $v > 0$  для

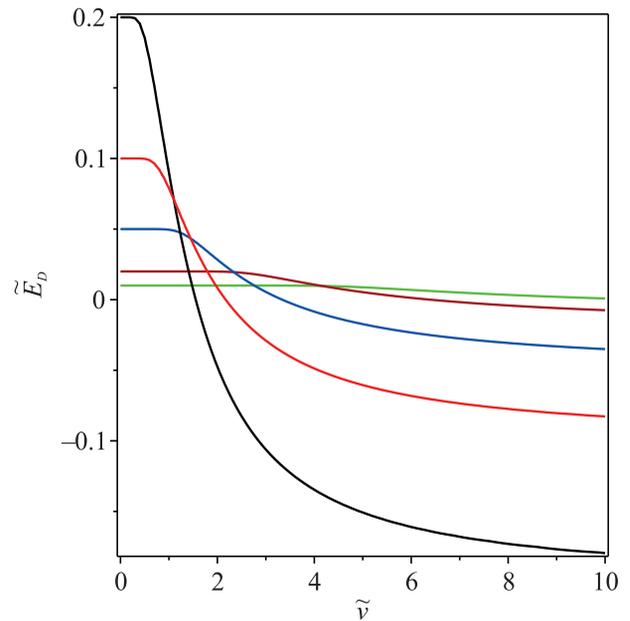


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимость энергии связанного электронного состояния от силы потенциального рассеяния на немагнитном короткодействующем дефекте при различных величинах обменной щели в спектре поверхностных состояний АФМ ТИ. Используются безразмерные величины:  $\tilde{E}_D = \frac{E_D \rho_0}{2A}$ ,  $\tilde{v} = \frac{v \rho_0}{2A}$ ,  $\tilde{\Delta} = \frac{\Delta \rho_0}{2A}$ , где  $\tilde{\Delta}$  принимает значения: 0.2 (черная линия), 0.1 (красная), 0.05 (синяя), 0.02 (коричневая), 0.01 (зеленая)

некоторых значений  $\Delta > 0$ . Можно видеть, что энергия связанного состояния  $E_D(v)$  сильно варьируется с амплитудой обменной щели. Рисунок 5 демонстрирует, как зависимость  $E_D(v)$  изменяется при включении магнитного момента на дефекте. Компонента  $\mu_z$  сдвигает ветви  $E_D^{(1)}$  и  $E_D^{(2)}$  вдоль горизонтальной

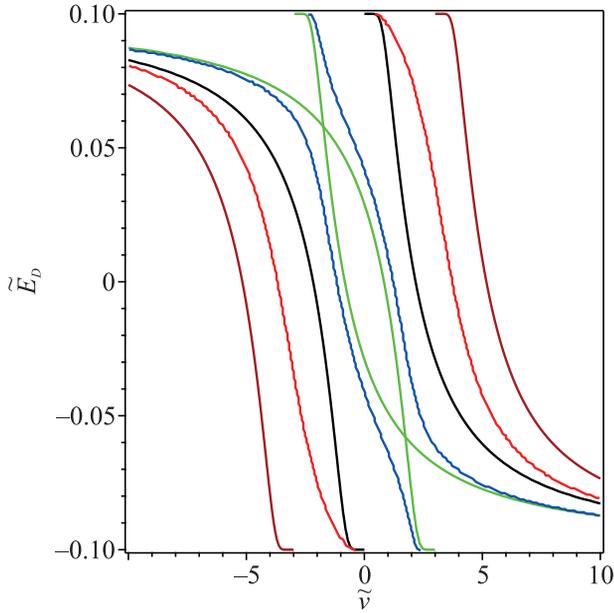


Рис. 5. (Цветной онлайн) Зависимость энергии связанного электронного состояния от силы потенциального рассеяния  $v$  при различных ориентациях магнитного момента  $\mu = (\mu_x, 0, \mu_z)$  короткодействующего дефекта на поверхности АФМ ТИ, именно:  $\tilde{\mu}_x = 0, \tilde{\mu}_z = 3$  (зеленые линии);  $\tilde{\mu}_x = 0, \tilde{\mu}_z = -3$  (коричневые);  $|\tilde{\mu}_x| = 1, |\tilde{\mu}_z| = \sqrt{8}$  (синие);  $|\tilde{\mu}_x| = 3, |\tilde{\mu}_z| = 0$  (красные). Для сравнения черными линиями представлены уровни для немагнитного дефекта с  $\mu_x = \mu_z = 0$ . Использованы безразмерные величины:  $\tilde{E}_D = \frac{E_D \rho_0}{2\Delta}$ ,  $\tilde{v} = \frac{v \rho_0}{2\Delta}$ ,  $\tilde{\mu}_{x,z} = \frac{\mu_{x,z} \rho_0}{2\Delta}$ ,  $\tilde{\Delta} = \frac{\Delta \rho_0}{2\Delta}$ , где  $\tilde{\Delta} = 0.1$

оси в противоположных направлениях, не меняя их форму. Таким образом: когда  $\mu_z < 0$ , какое-либо связанное состояние отсутствует в интервале  $|v| < |\mu_z|$ ; в свою очередь, когда  $\mu_z > 0$ , пара уровней одинаковой глубины и противоположного знака присутствуют в интервале  $|v| < |\mu_z|$ . Если имеется продольная компонента момента,  $\mu_x \neq 0$ , система (12) имеет два двухкомпонентных решения с  $f_1(\rho) \neq 0$  и  $f_2(\rho) \neq 0$ , которые соответствуют двум ветвям связанных состояний. Как понятно из рис. 5, требуется относительно большая сила зависящего от спина рассеяния  $\sim \mu_{x,z}$ , чтобы заметно повлиять на положение энергетических уровней внутри щели.

Если радиус локализации связанного состояния,  $\sim A/\sqrt{\Delta^2 - E_D^2}$ , превышает среднее расстояние между ближайшими дефектами, приближение уединенного дефекта становится некорректным. Опираясь на экспериментальные оценки [24], антиузельные дефекты  $\text{MnBi}$  на поверхности  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  можно рассматривать как невзаимодействующие при их концентрации ниже 4%.

**Обсуждение.** Согласно вышеизложенным теоретическим доводам, вариацию положения уровня связанного состояния на антиузельном дефекте  $\text{MnBi}$  в АФМ ТИ  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  под влиянием внешнего магнитного поля  $\mathbf{H}$  можно представить в виде

$$\frac{dE_D}{d\mathbf{H}} = \frac{\partial E_D}{\partial \mathbf{m}^{(n)}} \frac{d\mathbf{m}^{(n)}}{d\mathbf{H}} + \frac{\partial E_D}{\partial \mu} \frac{d\mu}{d\mathbf{H}}. \quad (13)$$

Здесь первое слагаемое возникает из-за перестройки магнитного порядка  $\mathbf{m}^{(n)}$ , второе – из-за переориентации момента на дефекте  $\text{MnBi}$ . В поле умеренной величины (до  $\sim 10$  Тл) эти два процесса коррелируют друг с другом,  $\frac{d\mathbf{m}^{(n)}}{d\mathbf{H}} \approx \frac{d\mu}{d\mathbf{H}}$ , так как в каждом СБ моменты на дефектах  $\text{MnBi}$ ,  $\sim \mu$ , проявляют сильную АФМ связь с намагниченностью  $\mathbf{m}^{(n)}$  центрального слоя, т.е.  $\mu \uparrow \downarrow \mathbf{m}^{(n)}$  [43]. Кроме того, реально в середине СБ моменты  $\text{Mn}$  показывают ферромагнитный порядок из-за магнитных вакансий на дефектах  $\text{Bi}_{\text{Mn}}$ , поэтому в измерениях намагниченности наблюдают редуцированный средний момент от  $2.66\mu_B$  [32] до  $3.9\mu_B$  [43] на атом  $\text{Mn}$ . Именно образцы с ферромагнитными слоями в СБ подвержены спин-флоп переходу при  $H_f \approx 3-4$  Тл и выстраиваются параллельно при  $H_s \approx 6-9$  Тл [1, 10, 28, 30, 40, 43]. Полная поляризация в  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ , когда все моменты – и на атомах  $\text{Mn}_{\text{Mn}}$  и на дефектах  $\text{MnBi}$  – направлены вдоль поля и показывают среднее значение  $4.6\mu_B$  на атом  $\text{Mn}$ , достигается в очень больших полях  $H \approx 60$  Тл [43]. Положение уровня  $E_D$ , как описано выше (рис. 5), слабо откликается на изменение направления момента  $\mu$ . К тому же, амплитуда  $\mu$ , как правило, не превышает силу потенциального рассеяния  $v$ . С другой стороны, мы показали, что переориентация намагниченности в поверхностных СБ (при фиксированных  $v$  и  $\mu$ ) может существенно повлиять на размер обменной щели  $2\Delta$  (рис. 2). В свою очередь,  $\frac{\partial E_D}{\partial \mathbf{m}^{(n)}} = \frac{\partial E_D}{\partial \Delta} \frac{d\Delta}{d\mathbf{m}^{(n)}}$ , где изменение энергии состояния на дефекте прямо связано с изменением размера щели,  $|E_D| < \Delta$  (рис. 4). Таким образом, основной вклад в  $\frac{dE_D}{d\mathbf{H}}$  вносит изменение ориентации моментов в центральных слоях СБ  $\mathbf{m}^{(n)}$  (первый член в (13)), которое наиболее выражено в неколлинеарной фазе в окрестности критического поля  $H_f$ . Причем величина поля спин-флоп перехода определяется траекторией перехода из АФМ фазы в ФМ фазу (или наоборот) и потому может принимать различные значения,  $H_f^{(1)}$  или  $H_f^{(2)}$ , в зависимости от взаимной ориентации моментов подрешеток  $\mathbf{m}^{(n)}$  при  $\mathbf{H} = 0$  и приложенного поля  $\mathbf{H} = H\mathbf{e}_z$ .

Связанное состояние порождает резкий пик плотности состояний, центрированный при энергии  $E_D$  внутри щели, который должен проявиться в тун-

нельной проводимости вблизи уровня Ферми. В работе [32] посредством низкотемпературной сканирующей микроскопии и спектроскопии на поверхности (0001) АФМ ТИ  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  ниже  $T_N$  было установлено формирование вблизи антиузельных дефектов  $\text{MnBi}$  связанных электронных состояний, локализованных на масштабе  $\sim 2.0$  нм. Авторы изучили эволюцию локальной плотности состояний вблизи дефекта с ростом внешнего магнитного поля, перпендикулярного поверхности, от  $-8$  до  $8$  Тл и обнаружили резкое изменение туннельных спектров в узкой окрестности (шириной  $\delta H \sim 2$  Тл) двух критических полей  $-2.0$  и  $4.0$  Тл, которые ассоциируются с поверхностными спин-флоп переходами. В остальной области исследования, которую занимают коллинеарные ФМ и АФМ фазы, изменение туннельных спектров оказалось незначительным. Разработанный выше теоретический подход по сути дела предлагает физический механизм обнаруженного в [32] нетривиального явления и на качественном уровне воспроизводит его основные черты.

**Заключение.** В данной работе мы аналитически исследовали не только поверхностные топологические состояния, но также связанные состояния на дефекте, свойственные собственному АФМ ТИ с неколлинеарной текстурой намагниченности. Наш подход основан на том характерном для собственных АФМ ТИ типа  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  факте, что длина проникновения поверхностного топологического состояния внутрь материала соизмерима с периодом АФМ порядка, а профиль электронной и спиновой плотности зависит от электростатического потенциала поверхности. Поэтому поверхностный спин-флоп переход в магнитной подсистеме, спровоцированный внешним полем, проявляется в основных характеристиках топологического состояния, в частности, в обменной щели. Мы показали, что электронный отклик системы на короткодействующее возмущение поверхностного потенциала проявляется как формирование связанного состояния, энергетический уровень которого определяется шириной обменной щели и силой возмущения. Наши результаты позволяют не только согласованно интерпретировать недавние эксперименты, но и вскрывают новые аспекты взаимосвязи магнитного порядка и нетривиальных электронных состояний в АФМ ТИ.

Настоящая работа выполнена при финансовой поддержке Санкт-Петербургского государственного университета (проект # 94031444).

1. M. M. Otrokov, I. I. Klimovskikh, H. Bentmann et al. (Collaboration), *Nature* **576**, 416 (2019).

2. Y. Tokura, K. Yasuda, and A. Tsukazaki, *Nat. Rev. Phys.* **1**, 126 (2019).
3. B. A. Bernevig, C. Felser, and H. Beidenkopf, *Nature* **603**, 41 (2022).
4. C.-Z. Chang, Ch.-X. Liu, and A. H. MacDonald, *Rev. Mod. Phys.* **95**, 011002 (2023).
5. H. Chi and J. S. Moodera, *APL Mater.* **10**, 090903 (2022).
6. A. Sekine and K. Nomura, *J. Appl. Phys.* **129**, 141101 (2021).
7. Y. Wang, F. Zhang, M. Zeng et al. (Collaboration), *Front. Phys.* **18**, 21304 (2023).
8. R. S. K. Mong, A. M. Essin, and J. E. Moore, *Phys. Rev. B* **81**, 245209 (2010).
9. 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).
10. D. Ovchinnikov, X. Huang, Z. Lin, Z. Fei, J. Cai, T. Song, M. He, Q. Jiang, C. Wang, H. Li, Y. Wang, Y. Wu, D. Xiao, J.-H. Chu, J. Yan, C.-Z. Chang, Y.-T. Cui, and X. Xu, *Nano Lett.* **21**, 2544 (2021).
11. A. M. Shikin, D. A. Estyunin, N. L. Zaitsev et al. (Collaboration), *Phys. Rev. B* **104**, 115168 (2021).
12. A. M. Shikin, D. A. Estyunin, I. I. Klimovskikh et al. (Collaboration), *Sci. Rep.* **10**, 13226 (2020).
13. А. М. Шикин, Д. А. Естюнин, Д. А. Глазкова, С. О. Фильнов, И. И. Климовских, *Письма в ЖЭТФ* **115**, 241 (2022).
14. Y.-J. Hao, P. Liu, Y. Feng et al. (Collaboration), *Phys. Rev. X* **9**, 041038 (2019).
15. H. Li, S.-Y. Gao, S.-F. Duan et al. (Collaboration), *Phys. Rev. X* **9**, 041039 (2019).
16. Y. Chen, L. Xu, J. Li et al. (Collaboration), *Phys. Rev. X* **9**, 041040 (2019).
17. P. Swatek, Y. Wu, L.-L. Wang, K. Lee, B. Schruck, J. Yan, and A. Kaminski, *Phys. Rev. B* **101**, 161109(R) (2020).
18. D. Nevoila, H. X. Li, J.-Q. Yan, R. G. Moore, H.-N. Lee, H. Miao, and P. D. Johnson, *Phys. Rev. Lett.* **125**, 117205 (2020).
19. M. Garnica, M. M. Otrokov, P. C. Aguilar et al. (Collaboration), *npj Quantum Mater.* **7**, 7 (2022).
20. V. N. Men'shov, I. A. Shvets, and E. V. Chulkov, *Phys. Rev. B* **106**, 205301 (2022).
21. Z. Huang, M.-H. Du, J. Yan, and W. Wu, *Phys. Rev. Materials* **4**, 121202 (2020).
22. X. Wu, C. Ruan, P. Tang, F. Kang, W. Duan, and J. Li, *Nano Lett.* **23**, 5048 (2023).
23. A. Zeugner, F. Nietschke, A. U. Wolter et al. (Collaboration), *Chem. Mater.* **31**, 2795 (2019).
24. M. Liu, C. Lei, H. Kim, Y. Li, L. Frammolino, J. Yan, A. H. MacDonald, and C.-K. Shih, *Proc. Natl. Acad. Sci.* **119**, e2207681119 (2022).

25. P. M. Sass, J. Kim, D. Vanderbilt, J. Yan, and W. Wu, *Phys. Rev. Lett.* **125**, 037201 (2020).
26. Y. Deng, Y. Yu, M. Z. Shi, Z. Guo, Z. Xu, J. Wang, X. H. Chen, and Y. Zhang, *Science* **367**, 895 (2020).
27. S. H. Lee, Y. Zhu, Y. Wang et al. (Collaboration), *Phys. Rev. Research* **1**, 012011 (2019).
28. C. Lei, O. Heinonen, A. H. MacDonald, and R. J. McQueeney, *Phys. Rev. Materials* **5**, 064201 (2021).
29. 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).
30. J. Cai, D. Ovchinnikov, Z. Fei, M. He, T. Song, Z. Lin, C. Wang, D. Cobden, J.-H. Chu, Y.-T. Cui, C.-Z. Chang, D. Xiao, J. Yan, and X. Xu, *Nat. Commun.* **13**, 1668 (2022).
31. M. P. Andersen, E. Mikheev, I. T. Rosen, L. Tai, P. Zhang, K. L. Wang, M. A. Kastner, and D. Goldhaber-Gordon, arXiv:2308.01183v1.
32. G. Qian, M. Shi, H. Chen, S. Zhu, J. Hu, Z. Huang, Y. Huang, X.-H. Chen, and H.-J. Gao, *Nano Res.* **16**, 1101 (2023).
33. I. P. Rusinov, V. N. Men'shov, and E. V. Chulkov, *Phys. Rev. B* **104**, 035411 (2021).
34. 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).
35. В. Н. Меньшов, И. П. Русинов, Е. В. Чулков, Письма в ЖЭТФ **114**, 768 (2021) [V. N. Men'shov, I. P. Rusinov, and E. V. Chulkov, *JETP Lett.* **114**, 699 (2021)].
36. В. Н. Меньшов, Е. В. Чулков, Письма в ЖЭТФ **117**, 147 (2023) [V. N. Men'shov and E. V. Chulkov, *JETP Lett.* **117**, 147 (2023)].
37. C.-X. Liu, X.-L. Qi, H. J. Zhang, X. Dai, Z. Fang, S.-C. Zhang, *Phys. Rev. B* **82**, 045122 (2010).
38. V. N. Men'shov, I. A. Shvets, V. V. Tugushev, and E. V. Chulkov, *Phys. Rev. B* **96**, 075302 (2017).
39. В. Н. Меньшов, И. А. Швец, Е. В. Чулков, Письма в ЖЭТФ **110**, 777 (2019) [V. N. Men'shov, I. A. Shvets, and E. V. Chulkov, *JETP Lett.* **110**, 771 (2019)].
40. 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).
41. J. Ge, Y. Liu, P. Wang, Z. Xu, J. Li, H. Li, Z. Yan, Y. Wu, Y. Xu, and J. Wang, *Phys. Rev. B* **105**, L201404 (2022).
42. Y. Zhang, K. Deng, X. Zhang, M. Wang, Y. Wang, C. Liu, J.-W. Mei, S. Kumar, E. F. Schwier, K. Shimada, C. Chen, and B. Shen, *Phys. Rev. B* **101**, 205126 (2020).
43. Y. Lai, L. Ke, J. Yan, R. D. McDonald, and R. J. McQueeney, *Phys. Rev. B* **103**, 184429 (2021).
44. J. Lu, W.-Y. Shan, H.-Z. Lu, and S.-Q. Shen, *New J. Phys.* **13**, 103016 (2011).
45. V. A. Sablikov and A. A. Sukhanov, *Phys. Status Solidi RRL* **8**, 853 (2014).
46. *Справочник по специальным функциям*, под ред. М. Абрамовица, И. Стиган, Наука, М. (1979).