

# ФЛУКТУАЦИОННЫЙ МЕХАНИЗМ ОДНОИОННОЙ АНИЗОТРОПИИ ТОПОЛОГИЧЕСКОГО ИЗОЛЯТОРА $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$

*В. В. Вальков\**, *А. О. Злотников*, *А. Гамов*

*Институт физики им. Л. В. Киренского,  
ФИЦ КНЦ Сибирского отделения Российской академии наук  
660036, Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 20 декабря 2024 г.,  
после переработки 20 февраля 2025 г.  
Принята к публикации 10 марта 2025 г.

Показано, что зарядовые флуктуации, инициируемые перескоками электронов, при учете спин-орбитального взаимодействия снимают шестикратное вырождение орбитального синглета  ${}^6S$  иона Mn в топологическом изоляторе  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  и приводят к одноионной анизотропии. При решении задачи введено мультиплетное представление для операторов рождения фермионов атомных состояний через операторы, описывающие переходы между многоэлектронными функциями. Во втором порядке операторной формы теории возмущений получены выражения для заселенностей  $n_M$  состояний ионов Mn при различных значениях проекции спина  $M$  терма  ${}^6S$  и определены константы одноионной анизотропии. Из вычислений следует, что флуктуационный механизм обеспечивает возможность реализации анизотропии типа «легкая ось», которая имеет место в  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ . При этом интервал значений константы анизотропии  $D_2$ , получающийся при варьировании исходных параметров модели, включает значение  $D_2 = -0.0095$  мэВ, необходимое для получения критического поля спин-флоп-перехода  $H_{sf}$ , известного из эксперимента. Предложенный механизм имеет широкую область применимости для описания анизотропии соединений, в которых основное состояние магнитоактивного иона в схеме слабого кристаллического поля описывается орбитальным синглетом.

DOI: 10.31857/S0044451025060100

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Экспериментальные данные по магнитным свойствам антиферромагнитного топологического изолятора (АФМ ТИ)  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  [1–4] показывают, что в низкотемпературной области значение  $g$ -фактора двухвалентных ионов Mn близко к 2, а величина спина  $S = 5/2$ . Поскольку номинальному состоянию иона  $\text{Mn}^{2+}$  в отмеченном соединении соответствует электронная конфигурация  $3d^5$ , приведенные значения  $g$ -фактора и спина говорят о реализации режима слабого кристаллического поля [5, 6]. В этом случае внутриаомное кулоновское взаимодействие электронов превалирует над межузельным взаимодействием. Поэтому основному состоянию иона  $\text{Mn}^{2+}$  соответствует терм  ${}^6S$  [7] с орбитальным моментом  $L = 0$ .

Равенство нулю орбитального момента для основного терма иона марганца приводит к тому, что в линейном по параметру спин-орбитального взаимодействия (СОВ) приближении одноионной анизотропии (ОА) в  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  не должно быть.

Между тем магнитные свойства этого соединения в антиферромагнитной фазе говорят об обратном. В частности, наблюдение в низкотемпературной области спин-флоп-перехода при возрастании магнитного поля, приложенного вдоль тригональной оси, указывает на наличие достаточно сильной одноосной анизотропии типа «легкая ось» [1, 3, 8, 9]. Этот вывод коррелирует также и с результатами других экспериментальных исследований [10].

Проблема микроскопического описания ОА для ионов с орбитальным синглетом обсуждалась в теории электронного парамагнитного резонанса [11, 12]. Один из сценариев возникновения ОА связан с смешиванием к терму  ${}^6S$  терма высокоэнергетической конфигурации  $3d^4 4s^1$ , для которого орбитальный момент отличен от нуля [11]. При таком подходе

\* E-mail: vvv@iph.krasn.ru

предполагается, что влияние окружения рассматриваемого иона можно свести к анализу его энергетического спектра во внешнем поле. В действительности же ион, находясь в кристаллической решетке, из-за перескоков электронов способен отдавать и принимать электроны. Благодаря таким зарядовым флуктуациям на ионе будет наводиться орбитальный момент. При учете СОВ это приведет к частичному снятию вырождения орбитального синглета.

В работе [13] методом теории функционала плотности (density functional theory, DFT) проводились расчеты параметра ОА при различных значениях интенсивности СОВ в ионах Mn и Te. Основным выводом сводился к тому, что нужное значение константы ОА появлялось лишь в том случае, когда СОВ учитывалось одновременно на ионах Te и Mn. При этом механизм формирования ОА связывался с изменением распределения электронной плотности на ионах Mn, индуцированной модификацией зарядового распределения на ионах Te, возникающего при учете СОВ электронов.

В электронном ансамбле, сконденсированном в форме многоэлектронных состояний ионов Te и Mn, характерная энергия кулоновского взаимодействия фермионов значительно превышает среднюю энергию СОВ. В этих условиях зарядовые флуктуации становятся более существенными и приводят к изменению электронных конфигураций отмеченных ионов, инициируя примешивание состояний, в которых орбитальные моменты отличны от нуля. Благодаря СОВ это вызывает частичное снятие вырождения орбитального синглета иона  $Mn^{2+}$  и обеспечивает появление ОА. Описанный сценарий переноса заряда между ионами Mn и Te составляет основу флуктуационного механизма индуцирования ОА в  $MnBi_2Te_4$ . Развитие теоретических представлений в этом направлении составляет предмет данной работы.

Результаты работы изложены следующим образом. В разд. 2 описывается рассматриваемая система и формулируется гамильтониан в атомном представлении, включающий наиболее существенные взаимодействия фермионов. В разд. 3 вводится мультиплетное представление для фермиевских операторов через многоэлектронные функции. Раздел 4 содержит результаты применения операторной формы теории возмущений в мультиплетном представлении. Раздел 5 посвящен выводу дополнительного правила отбора, обусловленного учетом симметрии кристаллической структуры. Ренормированные выражения для чисел заполнения одноионных состояний с разными значениями проекций спина ионов

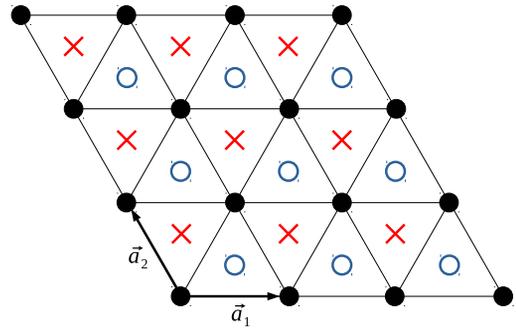


Рис. 1. Фрагмент кристаллической структуры трехслойки  $Te-Mn-Te$ . Положения ионов  $Mn^{2+}$ , обозначенных темными кружками, образуют треугольную решетку в средней плоскости трехслойки. Над и под ними находятся ионы  $Te^{2-}$ , упорядоченные по схеме треугольной решетки. Проекция центров верхних 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

$Mn$  приведены в разд. 6. Здесь же обсуждены полученные зависимости константы ОА от параметров спин-орбитальной связи в ионах теллура и марганца. Итоги проведенных исследований подводятся в Заключение.

## 2. ГАМИЛЬТониАН ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДСИСТЕМЫ «ТРЕХСЛОЙКИ» $Te-Mn-Te$

В  $MnBi_2Te_4$  слой ионов Mn находится между двумя слоями ионов Te. В каждом из таких слоев ионы упорядочены по типу треугольной решетки. Ионы Te, находящиеся в слое, расположенном над (под) слоем ионов Mn, смещены относительно положения ионов Mn так, как показано на рис. 1.

Решение задачи о флуктуационном механизме ОА проведем при учете электронных состояний ионов Mn и Te, входящих в трехслойку  $Te-Mn-Te$ , а также основных взаимодействий. Гамильтониан системы запишем в виде

$$H = H_0 + V_{mix}, \tag{1}$$

где слагаемое

$$H_0 = \sum_f \sum_{m_a \sigma} (\epsilon_a - \mu) d_{f m_a \sigma}^\dagger d_{f m_a \sigma} + V_c^d + H_{SO}^d + \frac{1}{2} \sum_{f \delta} \sum_{m_p \sigma} (\epsilon_p - \mu) p_{f+\delta, m_p \sigma}^\dagger p_{f+\delta, m_p \sigma} + H_{SO}^p \tag{2}$$

описывает не взаимодействующие между собой электронные подсистемы ионов Mn и Te,  $\varepsilon_d$  — энергия  $d$ -уровня,  $\mu$  — химический потенциал системы,  $d_{fm_d\sigma}^\dagger$  ( $d_{fm_d\sigma}$ ) — оператор уничтожения (рождения)  $d$ -электрона на ионе Mn, находящегося в узле с номером  $f$ , в состоянии с проекцией орбитального момента  $m_d$  ( $m_d = -2, -1, 0, 1, 2$ ) и проекцией спина  $\sigma$  ( $\sigma = \pm 1/2$ ).

Оператор кулоновского взаимодействия  $d$ -электронов  $V_c^d$  индуцирует расщепление уровня энергии заданной электронной конфигурации [7]. В результате для  $3d^5$ -конфигурации нижний по энергии терм соответствует орбитальному синглету  ${}^6S$ , тогда как для электронной конфигурации  $3d^6$  наименьшей энергией обладает терм  ${}^5D$  с орбитальным моментом  $L = 2$  и спином  $S = 2$ . Состояния этих двух термов будут учитываться в дальнейшем.

Оператор СОВ для ионов марганца, перешедших в состояние с электронной конфигурацией  $3d^6$  (терм  ${}^5D$ ) записывается в виде

$$H_{SO}^d = - \sum_f \lambda_d (\mathbf{L}_f \mathbf{S}_f), \quad (3)$$

где  $\mathbf{L}_f$  — оператор орбитального момента ( $L_d = 2$ ),  $\mathbf{S}_f$  — оператор спина ( $S_d = 2$ ), для отмеченного выше терма иона Mn, находящегося в узле  $f$ .

Четвертое слагаемое в (2) соответствует учету электронов, занимающих  $5p$ -состояния ионов Te, расположенных в узлах с номером  $l = f + \delta$ , где  $\delta$  — вектор, соединяющий ион Mn с ближайшим ионом Te ( $\delta$  принимает 6 значений в соответствии с тем, как показано на рис. 1). В этом слагаемом  $\varepsilon_p$  — энергия  $5p$ -орбитали иона  $\text{Te}^{2-}$ ,  $p_{lm_p\sigma}$  ( $p_{lm_p\sigma}^\dagger$ ) — оператор уничтожения (рождения) электрона, находящегося в состоянии с проекцией орбитального момента  $m_p = \pm 1, 0$  и проекцией спина  $\sigma = \pm 1/2$  на ионе Te, занимающего положение с номером  $l$ .

Оператор спин-орбитальной связи для подсистемы ионов  $\text{Te}^{1-}$ , находящихся в электронной конфигурации  $5p^5$ , терм  ${}^2P$  с орбитальным моментом  $L_p = 1$  и спином  $S_p = 1/2$  записывается аналогично оператору для ионов марганца:

$$H_{SO}^p = - \sum_l \lambda_p (\mathbf{L}_l \mathbf{S}_l). \quad (4)$$

Параметры  $\lambda_d$  и  $\lambda_p$  определяют интенсивности спин-орбитальных связей ионов Mn и Te для отмеченных термов соответственно.

В рассматриваемом механизме формирования ОА важное значение имеют зарядовые флуктуации,

обусловленные гибридизацией  $p$ - и  $d$ -электронных состояний, описываемые оператором

$$V_{mix} = \sum_{f\delta} \sum_{m_p m_d \sigma} \left[ t_{m_d m_p}(\delta) d_{fm_d\sigma}^\dagger p_{f+\delta, m_p \sigma} + \text{H.c.} \right], \quad (5)$$

в котором матричный элемент  $t_{m_d m_p}(\delta)$  определяет амплитуду интенсивности перехода электрона из  $p$ -состояния  $|m_p \sigma\rangle$  на ионе Te, занимающего положение с номером  $f + \delta$ , в  $d$ -состояние  $|m_d \sigma\rangle$  на ионе Mn, находящегося в узле с номером  $f$ .

### 3. ГАМИЛЬТониАН ТРЕХСЛОЙКИ В ПРОСТРАНСТВЕ МУЛЬТИПЛЕТНЫХ СОСТОЯНИЙ

Переход электрона с иона Te на ион Mn изменяет состояние этого иона:  ${}^6S \rightarrow {}^5D$ . Поскольку состояния терма с фиксированными значениями проекции орбитального момента и спина при включении СОВ не являются собственными состояниями гамильтониана, описывающего изолированные ионы, для применения теории возмущений для вырожденного уровня необходимо перейти к хорошо известному описанию, в котором состояния иона отражаются мультиплетным базисом [7].

Такое описание осуществляется на основе атомного представления [14], при котором гамильтониан не взаимодействующих между собой электронных подсистем ионов Mn и Te, но с учетом спин-орбитальной связи принимает диагональную форму:

$$H_0 = \sum_f \left\{ \sum_{M=-5/2}^{5/2} (E_5^d - 5\mu) Z_f^{M;M} + \sum_{J_d} \sum_{M_J} [E_6^d(J_d) - 6\mu] Z_f^{J_d M_J; J_d M_J} \right\} + \sum_l \left\{ (E_6^p - 6\mu) X_l^{0;0} + \sum_{J_p} \sum_{m_J} [E_5^p(J_p) - 5\mu] X_l^{J_p m_J; J_p m_J} \right\}. \quad (6)$$

В этом выражении оператор Хаббарда

$$Z_f^{M;M} = |f, M\rangle \langle f, M|$$

является проекционным оператором на состояние орбитального синглета  ${}^6S$  иона Mn, находящегося в узле  $f$ , с проекцией спина  $S^z = M$ , принимающей

значения  $-5/2, -3/2, \dots, 5/2$ . Вектор  $|f, 5/2\rangle$  определяется выражением

$$|f, 5/2\rangle = d_{2\uparrow}^\dagger d_{1\uparrow}^\dagger d_{0\uparrow}^\dagger d_{1\uparrow}^\dagger d_{2\uparrow}^\dagger |f, 0\rangle, \quad (7)$$

в котором  $|f, 0\rangle$  — вакуумное состояние,  $\bar{m} = -m$ .

Пять других состояний с  $M = 3/2, 1/2, \dots, -5/2$  описываются векторами, получающимися из (7) посредством последовательного применения оператора

$$S_f^- = \sum_{m=2}^2 d_{fm\downarrow}^\dagger d_{fm\uparrow}$$

к вектору  $|f, 5/2\rangle$  при учете соотношения

$$S_f^- |f, M\rangle = \sqrt{(5/2 + M)(5/2 - M + 1)} |f, M - 1\rangle.$$

В (6) энергия шестикратно вырожденного термина  ${}^6S$  обозначена  $E_5^d$ .

Второе слагаемое в первых фигурных скобках оператора  $H_0$  (6) соответствует учету состояний ионов Mn, находящихся в конфигурации  $3d^6$  с орбитальным моментом  $L = 2$  и спином  $S = 2$ . Принято во внимание, что за счет СОВ 25-кратно вырожденный терм  ${}^5D$  расщеплен на пять мультиплетов. Каждый мультиплет характеризуется полным моментом  $J_d = 4, 3, 2, 1, 0$  и энергией

$$E_6^d(J_d) = E_6({}^5D) - \lambda_d [J_d(J_d + 1)/2 - 6], \quad (8)$$

где  $E_6({}^5D)$  — энергия термина  ${}^5D$  конфигурации  $3d^6$ .

Диагональные операторы Хаббарда

$$Z_f^{J_d M_J; J_d M_J} = |f; J_d M_J\rangle \langle f; J_d M_J|$$

реализуют проецирование векторов гильбертова пространства на мультиплетное состояние иона Mn, имеющего электронную конфигурацию  $3d^6$ , орбитальный момент  $L = 2$ , спин  $S = 2$ , полный момент  $J_d$  и проекцию этого момента  $M_J$ .

Слагаемые  $H_0$ , стоящие во вторых фигурных скобках в (6), отражают наличие ионов Te, имеющих электронные конфигурации  $5p^6$  и  $5p^5$ . Энергия синглетной конфигурации обозначена посредством  $E_6^p$ . Оператор

$$X_l^{0;0} = |l, p^6\rangle \langle l, p^6|$$

проецирует вектор гильбертова пространства на состояние иона Te с полностью заполненной  $5p$ -оболочкой:

$$|l, p^6\rangle = p_{l1\uparrow}^\dagger p_{l1\downarrow}^\dagger p_{0\uparrow}^\dagger p_{0\downarrow}^\dagger p_{1\uparrow}^\dagger p_{1\downarrow}^\dagger |0\rangle.$$

Второе слагаемое, стоящее во вторых фигурных скобках в гамильтониане (6), учитывает состояния ионов Te, появляющиеся при переходе на ион Mn одного электрона из состояния  $|5p^6\rangle$ . Возникающее при этом на узле  $l$  состояние  $|l; J_p m_J\rangle$  характеризуется полным моментом  $J_p$ , который может принимать два значения:  $J_p = 3/2$  и  $J_p = 1/2$ , а также его проекцией  $m_J$ .

Энергия мультиплета с заданным значением  $J_p$  определяется выражением

$$E_5^p(J_p) = E_5^p - \lambda_p [J_p(J_p + 1)/2 - 11/8].$$

Введем мультиплетное представление для операторов  $d_{fm\sigma}^\dagger$ ,

$$d_{fm\sigma}^\dagger = \sum_{JM} D_{m\sigma}(J; M) Z_f^{J, M+m+\sigma; M}, \quad (9)$$

которое позволяет процесс появления электрона на ионе  $Mn^{2+}$  рассматривать как когерентную суперпозицию парциальных переходов этого иона из состояния  $|f; M\rangle$  в состояние  $|f; JM_J\rangle$ . Каждый из таких переходов в атомном представлении описывается недиагональным оператором Хаббарда

$$Z_f^{JM_J; M} = |f; JM_J\rangle \langle f; M|.$$

Параметры представления (9) могут быть записаны в виде произведения

$$D_{m\sigma}(J; M) = \Gamma_\sigma(M) C_J(m, M + \sigma) \quad (10)$$

функции

$$\Gamma_\sigma(M) = -2\sigma \sqrt{\frac{1}{2} - \frac{2M\sigma}{5}} \quad (11)$$

и коэффициента Клебша – Гордона  $C_J(m, M + \sigma)$  [7], который является матричным элементом, определяющим разложение базисных функций термина  ${}^5D$  по базисным функциям мультиплетов:

$$|m, M + \sigma\rangle = \sum_J C_J(m, M + \sigma) |J, M + m + \sigma\rangle. \quad (12)$$

Оператор уничтожения электрона на ионе Te, находящегося в узле с номером  $l$ , из состояния с проекцией орбитального момента  $m = \pm 1, 0$  и проекцией спина  $\sigma$  имеет более простую форму мультиплетного представления:

$$p_{lm\sigma} = \sum_{J_p} K_{J_p}(m, \sigma) X_l^{J_p, \bar{m}+\bar{\sigma}; 0}. \quad (13)$$

В этом выражении оператор

$$X_l^{J_p, m+\sigma; 0} = |l; J_p, m + \sigma\rangle \langle l, 0| \quad (14)$$

описывает изменение состояния иона Те на узле  $l$  из электронной конфигурации  $5p^6$  (такому состоянию ставится в соответствие вектор гильбертова пространства  $|l, 0\rangle$ ) в мультиплет с полным моментом  $J_p = 3/2, 1/2$  и его проекцией  $m + \sigma$ , относящийся к электронной конфигурации  $5p^5$ .

Коэффициенты в (13) определяются выражениями

$$\begin{aligned} K_{3/2}(m, \sigma) &= \sqrt{\frac{2 + 2m\sigma}{3}}, \\ K_{1/2}(m, \sigma) &= -2\sigma \sqrt{\frac{1 - 2m\sigma}{3}}. \end{aligned} \quad (15)$$

Использование полученных выражений позволяет записать оператор  $V_{mix}$  в мультиплетном представлении, необходимом для применения операторной формы теории возмущений для вырожденного уровня:

$$\begin{aligned} V_{mix} &= \sum_{f\delta} \sum_{m_p, m_d, \sigma} \sum_{J_d, J_p, M} \left\{ t_{m_p, m_d}(\delta) \times \right. \\ &\times \Gamma_\sigma(M) C_{J_d}(m_d, M + \sigma) K_{J_p}(m_p, \sigma) \times \\ &\times Z_f^{J_d, M + m_d + \sigma; M} X_{f+\delta}^{J_p, \overline{m}_p + \overline{\sigma}; 0} + \text{H.c.} \left. \right\}. \end{aligned} \quad (16)$$

#### 4. РАСЩЕПЛЕНИЕ СОСТОЯНИЙ ОРБИТАЛЬНОГО СИНГЛЕТА $^6S$ ИОНА $Mn^{2+}$

Основному состоянию гамильтониана  $H_0$  (6) соответствуют номинальные значения зарядов ионов  $Mn^{2+}$ ,  $Te^{2-}$ . При этом уровень энергии  $E_5^d$  каждого иона марганца шестикратно вырожден. Следовательно, учет зарядовых флуктуаций можно провести только в рамках теории возмущений для вырожденного уровня [7]. С этой целью удобно использовать операторную форму теории возмущений [15].

Введем проекционный оператор

$$P = \left( \prod_f \sum_M Z_f^{MM} \right) \left( \prod_l X_l^{0;0} \right), \quad (17)$$

осуществляющий проецирование гильбертова пространства изучаемой системы на подпространство номинальных состояний гамильтониана  $H_0$ .

Рассматривая  $V_{mix}$  как возмущение, получим, что во втором порядке теории возмущений эффективный гамильтониан трехслойки Те–Mn–Те запишется в виде

$$H_{eff} = \sum_f \sum_{M=-5/2}^{5/2} E_5^d Z_f^{M;M} + \sum_l E_6^p X_l^{0;0} + H_{eff}^{(2)}, \quad (18)$$

где вклад второго порядка, определяемый выражением

$$H_{eff}^{(2)} = -PV_{mix} \left( \frac{1}{H_0 - E_0} \right) V_{mix}P, \quad (19)$$

приводит к частичному снятию вырождения термина  $^6S$ , которое в соответствии с теоремой Вигнера–Эккарта может быть описано в терминах ОА.

Для получения гамильтониана ОА в явном виде подставим в (19) оператор гибридизации в мультиплетном представлении (16) и учтем выражение для оператора проецирования. Опуская простые промежуточные вычисления, находим оператор  $H_{eff}^{(2)}$ :

$$H_{eff}^{(2)} = - \sum_f \sum_{M'M} V_{M'M}^{(2)} Z_f^{M'M}, \quad (20)$$

где матричные элементы имеют вид

$$\begin{aligned} V_{M'M}^{(2)} &= \sum_{m_p, m_d} \sum_{m'_p, m'_d} \left\{ \sum_\delta t_{m'_d, m'_p}^*(\delta) t_{m_d, m_p}(\delta) \right\} \times \\ &\times \sum_{J_p, J_d, \sigma, \sigma'} \frac{\Gamma_{\sigma'}(M') \Gamma_\sigma(M) K_{J_p}(m'_p, \sigma') K_{J_p}(m_p, \sigma)}{\Delta_{dp} + E_{SO}^d(J_d) + E_{SO}^p(J_p)} \times \\ &\times C_{J_d}(m'_d, M' + \sigma') C_{J_d}(m_d, M + \sigma) \times \\ &\times \Delta(m'_p + \sigma' - m_p - \sigma) \times \\ &\times \Delta(m'_d + M' + \sigma' - m_d - M - \sigma). \end{aligned} \quad (21)$$

В этом выражении

$$\Delta_{dp} = E(^5D) - E_5^d + E_5^p - E_6^p$$

определяет энергию возбуждения при переходе электрона с иона Те на ион Mn без учета спин-орбитального взаимодействия,  $\Delta(x - x')$  — символ Кронекера.

Величины  $E_{SO}^d(J_d)$  и  $E_{SO}^p(J_p)$  обозначают энергии СОВ для ионов марганца и теллура соответственно:

$$\begin{aligned} E_{SO}^d(J_d) &= -\lambda_d [J_d(J_d + 1)/2 - 6], \\ E_{SO}^p(J_p) &= -\lambda_p [J_p(J_p + 1)/2 - 11/8]. \end{aligned}$$

## 5. ТРИГОНАЛЬНАЯ СИММЕТРИИ И ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ ПРАВИЛА ОТБОРА

Отмеченное ранее упорядочение ионов теллура и марганца по типу треугольной решетки, а также их взаимное расположение (см. рис. 1), приводят к важным симметричным свойствам интегралов перескока  $t_{m_d m_p}(\delta)$ . Для описания этих свойств введем следующие обозначения. Три вектора, соединяющие ион Mn с тремя ближайшими ионами Te, находящимися в плоскости, расположенной над плоскостью ионов Mn, будем обозначать как  $\delta_1$ ,  $\delta_2$  и  $\delta_3$ . Возрастание номера вектора соответствует движению против часовой стрелки.

Три других вектора, соединяющих ион Mn с тремя ближайшими ионами Te, расположенными под плоскостью ионов Mn, будем обозначать символами  $\delta'_1$ ,  $\delta'_2$ ,  $\delta'_3$ . Соответствие между номером вектора  $\delta'_i$  и его ориентацией такое же, как и для векторов  $\delta_i$ .

Законы преобразований для сферических функций при поворотах вокруг оси третьего порядка приводят к тому, что

$$\begin{aligned} t_{m_d m_p}(\delta_n) &= \exp\left\{-\frac{2\pi i}{3}(m_d - m_p)(n - 1)\right\} t_{m_d m_p}(\delta_1), \\ t_{m_d m_p}(\delta'_n) &= \exp\left\{-\frac{2\pi i}{3}(m_d - m_p)(n - 1)\right\} t_{m_d m_p}(\delta'_1), \end{aligned} \quad (22)$$

где  $n = 1, 2, 3$ . Эти соотношения дают дополнительные «правила отбора», поскольку

$$\begin{aligned} \frac{2}{Z} \sum_{\delta} t_{m'_d m'_p}^*(\delta) t_{m_d m_p}(\delta) &= \\ &= \left[ t_{m'_d m'_p}^*(\delta_1) t_{m_d m_p}(\delta_1) + t_{m'_d m'_p}^*(\delta'_1) t_{m_d m_p}(\delta'_1) \right] \times \\ &\quad \times \left[ \Delta(m_d - m'_d - m_p + m'_p + 3N_P) \right], \end{aligned} \quad (23)$$

где  $Z = 6$  — число ближайших соседей для иона марганца,  $N_P = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ . Случай, когда  $N_P \neq 0$ , соответствует учету процессов переброса, происхождение которых, как обычно, является следствием дискретной группы преобразований. В нашем рассмотрении эти процессы вклада не дают.

## 6. ИНТЕГРАЛЫ ПЕРЕСКОКА

Известно, что первопринципные расчеты электронной структуры на основе методов DFT позволяют получить набор блоховских функций  $\psi_{nk}(\mathbf{r})$  и энергетический спектр системы в  $K$ -пространстве. С их помощью можно определить набор функций

Ванье  $\phi_{m\mathbf{R}}(\mathbf{r})$ , в которых  $\mathbf{R}$  задает координаты центра локализации этих функций. На основе такого базиса рассчитываются параметры перескока как средние DFT-гамильтониана по базису  $\phi_{m\mathbf{R}}$  и определяется эффективный гамильтониан в приближении сильной связи. Однако нахождение функций  $\phi_{m\mathbf{R}}$  затруднительно для многозонной электронной структуры в связи с наличием пересекающихся зон, а также с тем, что существует неопределенность в выборе фазового множителя для различных функций  $\psi_{nk}$  при фиксированном  $k$ . В результате полученные функции Ванье, вообще говоря, могут не являться локализованными. Чтобы преодолеть это, был предложен численный метод, в рамках которого функции Ванье находятся на основе определенных комбинаций функций  $\psi_{nk}$ , обеспечивающих максимальную локализацию  $\phi_{m\mathbf{R}}$  вблизи  $\mathbf{R}$  (см. обзоры [16, 17]).

Для  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  максимально локализованные функции Ванье использовались при расчетах электронной структуры поверхностных состояний и топологических инвариантов [1, 18, 19] (в том числе с помощью программного пакета для топологических материалов, представленного в [20]), а также холловской проводимости [21, 22] и коэффициента линейного магнитоэлектрического эффекта [23]. Отметим, что зачастую построенные эффективные гамильтонианы для  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  учитывают только  $p$ - $p$ -перескоки между ионами Te–Te, Bi–Bi, а также ионами Te–Bi [19, 22], так как именно эти состояния существуют вблизи уровня Ферми и важны для описания отмеченных выше свойств. Однако, насколько нам известно, расчет на основе описанных подходов параметров  $p$ - $d$ -перескоков для  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ , которые играют определяющую роль при формировании магнитного упорядочения в нем (см. также работу [24]), не проводился.

При нахождении интегралов перескока  $t_{m_d m_p}(\delta_1)$  и  $t_{m_d m_p}(\delta'_1)$  примем во внимание, что функции Блоха электронных состояний ионов трехслойки Te–Mn–Te задаются решениями уравнения Шредингера с гамильтонианом

$$\hat{h} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{eff}(r), \quad (24)$$

в котором  $m$  — масса электрона,  $\Delta$  — оператор Лапласа,  $V_{eff}(r)$  — эффективный периодический потенциал, создаваемый ионными остовами и самосогласованным полем, возникающим из-за кулоновского взаимодействия электронов.

Используя метод сильной связи, примененный впервые Вильсоном для анализа расщепления вы-

**Таблица 1.** Значения интегралов перескока  $t_{m_d m_p}(\delta_1)$  в электронвольтах между ионом Mn и ближайшим ионом Te в верхней плоскости трехслойки Te–Mn–Te, занимающим положение, характеризуемое вектором  $\delta_1$

$m_d \backslash m_p$	1	0	-1
2	$-0.31 + 0.54i$	$0.05 - 0.03i$	$-0.06$
1	$-0.37i$	$0.20 - 0.35i$	$0.07 - 0.04i$
0	$-0.13 - 0.22i$	$0.53i$	$-0.13 + 0.22i$
-1	$-0.07 - 0.04i$	$0.20 + 0.35i$	$-0.37i$
-2	$-0.06$	$-0.05 - 0.03i$	$-0.31 - 0.54i$

рожденных электронных  $p$ -уровней [25], получим, что интеграл перескока между ионом марганца и ионом теллура, занимающим по отношению к иону Mn позицию, характеризуемую вектором  $\delta$ , определяется выражением

$$t_{m_d m_p}(\delta) = \int \Phi_{dm_d}^*(r) \hat{h} \Phi_{pm_p}(r - \delta) dr, \quad (25)$$

где  $\Phi_{dm_d}^*(r)$  — функция Ванье, соответствующая  $d$ -состоянию иона Mn, находящегося в начале системы координат с проекцией орбитального момента  $m_d$ ,  $\Phi_{pm_p}(r - \delta)$  — функция Ванье, соответствующая  $p$ -состоянию иона Te, находящегося в узле, определяемом вектором  $\delta$ , с проекцией орбитального момента  $m_p$ .

Поскольку входящие в определение интеграла перескока периодический потенциал и функции Ванье могут быть найдены лишь приближенно, в дальнейшем воспользуемся аппроксимационной схемой. В соответствии с ней в качестве функций  $\Phi_{dm_d}^*(r)$  и  $\Phi_{pm_p}(r - \delta)$  будут использоваться водородоподобные функции для  $3d$ - и  $5p$ -состояний электронов, участвующих в заполнении электронных оболочек ионов марганца и теллура соответственно. При этом в качестве  $V_{eff}(r)$  применяется среднеполевой потенциал, создаваемый ионными остовами и потенциалом кулоновского отталкивания электронов.

Следует подчеркнуть, что получаемые при таком подходе величины  $t_{m_d m_p}(\delta)$  могут соответствовать истинным значениям лишь с точностью до коэффициента порядка единицы. Существенно, однако, что при изменении этого коэффициента возникающий интервал значений параметра одноионной анизотропии соответствует значению, известному из экспериментальных данных по спин-флоп-переходу. Важно и то, что применяемый метод вычисления в полной мере сохраняет отмеченные выше симметричные свойства интегралов  $t_{m_d m_p}(\delta)$ .

**Таблица 2.** Значения интегралов перескока  $t_{m_d m_p}(\delta'_1)$  в электронвольтах между ионом Mn и ближайшим ионом Te в нижней плоскости трехслойки Te–Mn–Te, занимающим положение, характеризуемое вектором  $\delta'_1$

$m_d \backslash m_p$	1	0	-1
2	$0.31 + 0.54i$	$0.05 + 0.03i$	$0.06$
1	$0.37i$	$-0.20 - 0.35i$	$0.07 + 0.04i$
0	$0.13 - 0.22i$	$-0.53i$	$0.13 + 0.22i$
-1	$-0.07 + 0.04i$	$-0.20 + 0.35i$	$0.37i$
-2	$0.06$	$-0.05 + 0.03i$	$0.31 - 0.54i$

В табл. 1 приведены интегралы перескока для различных значений  $m_d$  и  $m_p$ , если  $\delta = \delta_1$ . В декартовой системе координат с осью  $x$ , направленной вдоль вектора  $\mathbf{a}_1$ , (см. рис. 1) и осью  $z$ , ориентированной перпендикулярно слою ионов Mn, этот вектор определяется выражением  $\delta_1 = (a/2, -a/(2\sqrt{3}), h)$ , где  $a = 4.28 \text{ \AA}$  — расстояние между ближайшими ионами Mn,  $h = 1.66 \text{ \AA}$  — расстояние между плоскостями ионов Mn и Te.

Значения интегралов перескока для вектора  $\delta'_1 = (a/2, a/(2\sqrt{3}), -h)$  приведены в табл. 2.

Значения  $t_{m_d, m_p}(\delta)$  для других  $\delta$  удовлетворяют отмеченным выше условиям (22).

### 7. КОНСТАНТА ОДНООСНОЙ АНИЗОТРОПИИ И РЕНОРМИРОВКА ЭНЕРГИИ ТЕРМА ${}^6S$

При учете дополнительного правила отбора (23) оператор  $H_{eff}^{(2)}$  диагонален по индексам  $M$  и  $M'$ :

$$H_{eff}^{(2)} = \sum_f \sum_M E_M^{(2)} Z_f^{MM},$$

где

$$E_M^{(2)} = -\frac{Z}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \Gamma_{\sigma'}(M) \Gamma_{\sigma}(M) \sum_{m_p m_d} T_{m_d m_p}^{\sigma, \sigma'} \times \\ \times \sum_{J_p J_d} \left\{ \frac{K_{J_p}(m_p + \sigma - \sigma', \sigma') K_{J_p}(m_p, \sigma)}{\Delta_{dp} + E_{SO}^d(J_d) + E_{SO}^p(J_p)} \right. \\ \left. \times C_{J_d}(m_d + \sigma - \sigma', M + \sigma') C_{J_d}(m_d, M + \sigma) \right\}. \quad (26)$$

В этом выражении  $T_{m_d m_p}^{\sigma, \sigma'}$  — комбинация произведений интегралов перескоков

$$T_{m_d m_p}^{\sigma, \sigma'} = t_{m_d + \sigma - \sigma', m_p + \sigma - \sigma'}^*(\delta_1) t_{m_d, m_p}(\delta_1) + \\ + t_{m_d + \sigma - \sigma', m_p + \sigma - \sigma'}^*(\delta'_1) t_{m_d, m_p}(\delta'_1). \quad (27)$$

Из свойств симметрии коэффициентов Клебша – Гордона, функции  $\Gamma_\sigma(M)$  и интегралов перескока  $t_{m_d m_p}$  следует, что  $E_M^{(2)} = E_{-M}^{(2)}$ . Это соответствует картине расщепления терма с  $S = 5/2$  в поле одноосной анизотропии.

Принимая во внимание правило сумм

$$\sum_M Z_f^{MM} = 1,$$

получим, что операторное выражение

$$R_f = \sum_M E_M^{(2)} Z_f^{MM}$$

может быть представлено в виде

$$R_f = \Delta E^{(2)} \hat{I}_{6f} + B_2^0 O_{2f}^0 + B_4^0 O_{4f}^0, \quad (28)$$

где

$$\begin{aligned} O_{2f}^0 &= 3(S_f^z)^2 - S(S+1), \\ O_{4f}^0 &= 35(S_f^z)^4 - [30S(S+1) - 25](S_f^z)^2 + \\ &+ 3S^2(S+1)^2 - 6S(S+1) \end{aligned} \quad (29)$$

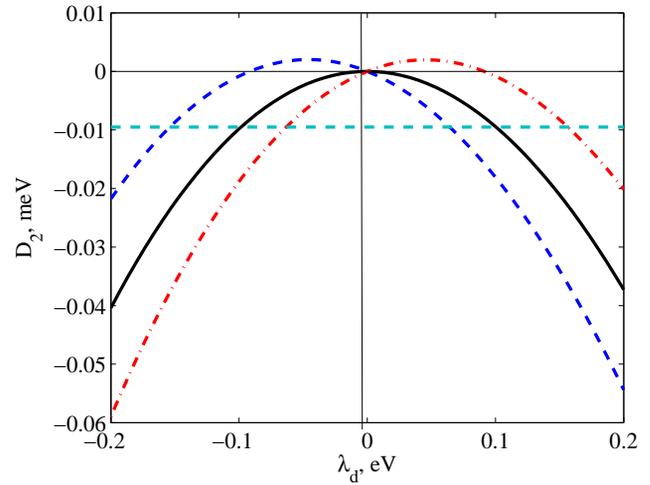
— операторы Стевенса [26], применяемые при описании анизотропии на основе эквивалентного гамильтониана [27]. Посредством  $\hat{I}_{6f}$  обозначена единичная матрица размером  $6 \times 6$ , относящаяся к узлу с номером  $f$ .

Флуктуационный сдвиг  $\Delta E^{(2)}$  определяет ренормировку энергии терма  ${}^6S$ , возникающую во втором порядке теории возмущений и приводящую к понижению энергии этого терма. Его величина, а также значения параметров ОА  $B_2^0$  и  $B_4^0$  связаны с энергиями  $E_M^{(2)}$  линейными уравнениями:

$$\begin{aligned} \Delta E^{(2)} &= (E_{1/2}^{(2)} + E_{3/2}^{(2)} + E_{5/2}^{(2)})/3, \\ B_2^0 &= (5E_{5/2}^{(2)} - 4E_{1/2}^{(2)} - E_{3/2}^{(2)})/84, \\ B_4^0 &= (E_{5/2}^{(2)} + 2E_{1/2}^{(2)} - 3E_{3/2}^{(2)})/840. \end{aligned} \quad (30)$$

Использование данных табл. 1 и 2, а также выражений (26) и (30) позволяет найти зависимости величины  $D_2$  (этот параметр соответствует записи оператора энергии анизотропии в виде  $H_A = D_2(S^z)^2$ , при этом имеет место следующее соотношение  $D_2 = 3B_2^0$ ) от констант спин-орбитальной связи  $\lambda_d$  и  $\lambda_p$ . Величина  $\Delta_{dp} = 10$  эВ.

Результаты вычислений представлены в графической форме на рис. 2 и 3. На первом из них показаны зависимости величины  $D_2$  от константы спин-орбитальной связи  $\lambda_d$  при трех значениях параметра СОВ  $\lambda_p = -0.02, 0, 0.02$  эВ.

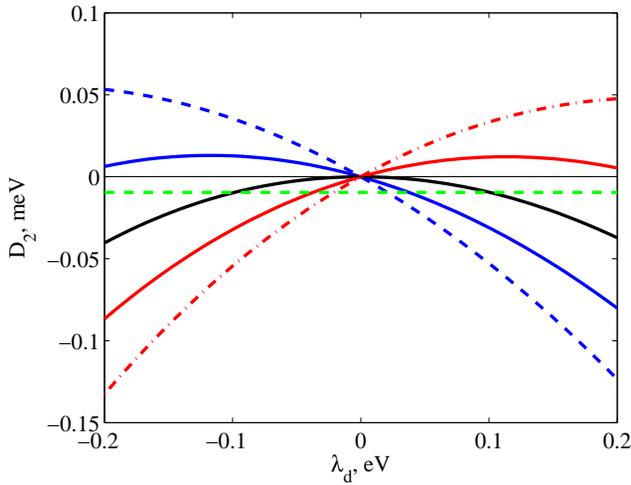


**Рис. 2.** Зависимости параметра анизотропии  $D_2$  от  $\lambda_d$  при трех значениях  $\lambda_p$ . Черная сплошная линия построена для  $\lambda_p = 0$ . Красная штрихпунктирная линия соответствует значению  $\lambda_p = 0.02$  эВ. Штриховая синяя линия построена для  $\lambda_p = -0.02$  эВ. Горизонтальная штриховая линия обозначает значение  $D_2 = -0.0095$  мэВ, соответствующее значению параметра ОА  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ , определенному из данных по спин-флоп-переходу

Если  $\lambda_p = 0$ , то при всех допустимых  $\lambda_d$  реализуется только анизотропия типа «легкая ось», когда  $D_2 < 0$ . Зависимость  $D_2(\lambda_d)$  для этого случая показана на рис. 2 черной линией. Штриховая горизонтальная линия на этом рисунке соответствует значению  $D_2 = D_2^{(exp)} = -0.0095$  мэВ, которое получается из обработки экспериментальных данных по спин-флоп-переходу в  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  [1, 3, 8–10, 28]. Две точки пересечения этой линии и черной кривой указывают на то, что требуемое для эксперимента значение  $D_2 < 0$  имеет место как при  $\lambda_d > 0$ , так и при  $\lambda_d < 0$ . Заметим, что в данном случае отмеченные пересечения имеют место при достаточно большой величине абсолютного значения  $\lambda_d$ .

При включении даже слабого СОВ для возбужденного терма иона Те ( $|\lambda_p| = 0.02$  эВ) происходит качественное изменение зависимости  $D_2(\lambda_d)$ . Прежде всего исчезает симметрия относительно смены знака  $\lambda_d$ , поскольку возникает смещение кривой относительно начала координат.

При положительном  $\lambda_p$  график смещается вверх и вправо (красная штрихпунктирная линия на рис. 2). Это приводит к значительной модификации фазовой диаграммы системы, поскольку в правой окрестности точки  $\lambda_d = 0$  появляется интервал изменения  $\lambda_d$ , в пределах которого реализуется



**Рис. 3.** Зависимости  $D_2(\lambda_d)$  при пяти значениях параметра  $\lambda_p$ :  $\lambda_p = -0.1$  эВ (красная штрихпунктирная линия),  $\lambda_p = -0.05$  эВ (красная сплошная линия),  $\lambda_p = 0.05$  эВ (синяя сплошная линия), до  $\lambda_p = 0.1$  эВ (синяя штриховая линия). Черная сплошная линия соответствует значению  $\lambda_p = 0$ . Горизонтальная штриховая линия имеет тот же смысл, что и на рис. 2

анизотропия типа «легкая плоскость». При этом анизотропия типа «легкая ось» имеет место, лишь начиная с некоторого значения  $\lambda_d > 0$ .

В области отрицательных  $\lambda_d$  реализуется анизотропия типа «легкая ось» при всех  $\lambda_d$ . Для практических целей существенно, что в этом случае значение  $D_2 = D_2^{(exp)}$  достигается при меньшем по сравнению со случаем  $\lambda_d = 0$  значением  $|\lambda_d|$ .

При отрицательном  $\lambda_p$  (синяя штриховая линия на рис. 2) график смещается вверх и влево. Нетрудно видеть, что в этом случае появляется небольшой интервал отрицательных значений  $\lambda_d$ , в пределах которого реализуется анизотропия типа «легкая плоскость». За пределами этого интервала имеет место анизотропия типа «легкая ось».

Как и в первом случае, имеет место следующая закономерность: если произведение  $\lambda_d \lambda_p < 0$ , то значение  $D_2 = D_2^{(exp)}$  достигается при меньших  $|\lambda_d|$ . Если же  $\lambda_d \lambda_p > 0$ , то для получения требуемого значения  $D_2 = D_2^{(exp)}$  необходимо брать большие  $|\lambda_d|$ .

Модификация зависимостей  $D_2(\lambda_d)$  при значительной интенсивности СОВ на возбужденных состояниях ионов Те показана на рис. 3. Главный вывод заключается в том, что для значений  $|\lambda_p| \simeq 0.1$  эВ анизотропия типа «легкая ось» реализуется только при выполнении условия  $\lambda_d \lambda_p < 0$ , поскольку вторая ветвь параболы пересекает линию

$D_2 = 0$  при нереально больших константах  $|\lambda_d|$ .

Представленные результаты коррелируют с выводами, полученными на основе численных расчетов методом DFT [13]. В этой работе отмечалось, что соответствие с экспериментальными данными возникает в том случае, когда одновременно отличны от нуля как  $\lambda_p$ , так и  $\lambda_d$ . В нашем случае такой вывод приходится делать потому, что при  $\lambda_p = 0$  значение  $\lambda_d$ , при котором получается  $D_2 = -0.0095$  мэВ имеет слишком большую величину. В то же время для  $\lambda_p \neq 0$  необходимое значение параметра анизотропии достигается при значительно меньших  $\lambda_d$ .

Параметр  $B_4^0 = 0$ , так как в теории возмущений второго порядка неприводимые слагаемые четвертой степени не возникают.

Флуктуационный сдвиг  $\Delta E^{(2)}$ , соответствующий уменьшению одноионной энергии во втором порядке теории возмущений, при выбранных значениях параметров системы оказывается порядка  $-1$  эВ.

### 8. ПАРАМЕТР $D_2$ И СДВИГ $\Delta E^{(2)}$ ПРИ $\Delta_{dp} \gg E_{SO}$

При реальных значениях  $\Delta_{dp}$ ,  $\lambda_d$ ,  $\lambda_p$  отношение

$$|E_{SO}^d(J_d) + E_{SO}^p(J_p)| / \Delta_{dp} \equiv \epsilon \ll 1 \quad (31)$$

образует параметр малости. Поэтому знаменатель выражения (26) можно разложить в ряд по  $\epsilon$ . После этого суммирование по  $\sigma$ ,  $\sigma'$ ,  $J_p$  и  $J_d$  удастся провести в явном виде.

Принимая во внимание соотношения ортонормированности коэффициентов Клебша–Гордона, их симметричные свойства, а также равенство  $|t_{m_a m_p}(\delta)| = |t_{m_a m_p}(\delta')|$ , справедливость которого нетрудно установить на основе данных табл. 1 и 2, получим, что зависимости величин  $E_M^{(2)}$  от констант спин-орбитальной связи с квадратичной по параметру  $\epsilon$  точно определяются выражениями

$$\begin{aligned} E_{5/2}^{(2)} &= -A - B\lambda_p^2 + C\lambda_p\lambda_d - F_{5/2}\lambda_d^2, \\ E_{3/2}^{(2)} &= -A - B\lambda_p^2 + C\lambda_p\lambda_d/5 - F_{3/2}\lambda_d^2, \\ E_{1/2}^{(2)} &= -A - B\lambda_p^2 - C\lambda_p\lambda_d/5 - F_{1/2}\lambda_d^2, \end{aligned} \quad (32)$$

где

$$\begin{aligned} A &= Z \sum_{m_a m_p} \frac{|t_{m_a m_p}|^2}{\Delta_{dp}}, \quad B = \frac{A}{2\Delta_{dp}^2}, \\ C &= 4Z \left( \frac{|t_{1,1}|^2 - |t_{-1,1}|^2 + 2|t_{2,1}|^2 - 2|t_{-2,1}|^2}{\Delta_{dp}^3} \right), \end{aligned}$$

а зависящие от  $M$  коэффициенты  $F_M$  представимы в виде

$$F_{5/2} = \frac{6Z}{\Delta_{dp}^3} \sum_{m_p} \left( 6|t_{2,m_p}|^2 + 3|t_{1,m_p}|^2 + |t_{0,m_p}|^2 \right),$$

$$F_{3/2} = \frac{6Z}{5\Delta_{dp}^3} \sum_{m_p} (18|t_{2,m_p}|^2 + 21|t_{1,m_p}|^2 + 11|t_{0,m_p}|^2),$$

$$F_{1/2} = \frac{12Z}{5\Delta_{dp}^3} \sum_{m_p} (6|t_{2,m_p}|^2 + 12|t_{1,m_p}|^2 + 7|t_{0,m_p}|^2).$$

Использование соотношения (30), а также полученных выражений для  $F_M$  позволяет получить простую формулу для параметра анизотропии

$$D_2 = -F\lambda_d^2 + \frac{C}{5}\lambda_p\lambda_d, \quad (33)$$

в которой

$$F = \frac{9Z}{5\Delta_{dp}^3} \sum_{m_p} \left( 2|t_{2,m_p}|^2 - |t_{1,m_p}|^2 - |t_{0,m_p}|^2 \right). \quad (34)$$

Поскольку коэффициенты при слагаемых  $\lambda_p^2$  в (32) одинаковые, то, согласно (30),  $D_2$  не зависит от  $\lambda_p$ . Однако такие слагаемые дают вклад в ренормировку энергии терма  ${}^6S$ , которая может быть записана в виде

$$\Delta E^{(2)} = -A \left( 1 + \frac{1}{2} \frac{\lambda_p^2}{\Delta_{dp}^2} + 12 \frac{\lambda_d^2}{\Delta_{dp}^2} \right) + \frac{C}{3} \lambda_p \lambda_d. \quad (35)$$

Из табл. 1 и 2 видно, что для рассматриваемого случая

$$|t_{1,1}| \gg |t_{-1,1}|, \quad |t_{2,1}| \gg |t_{-2,1}|. \quad (36)$$

Поэтому величина

$$C \simeq 4Z \left( \frac{|t_{1,1}|^2 + 2|t_{2,1}|^2}{\Delta_{dp}^3} \right) \simeq \left( \frac{4Z}{\Delta_{dp}^3} \right) 0.91 \quad (37)$$

заведомо положительна.

С другой стороны, для величины  $F$  вклад слагаемых с отрицательными знаками в (34) является соизмеримым с вкладом положительных слагаемых. В результате происходит компенсация таким образом, что в выражении для  $F$  возникает малый множитель:

$$F \simeq \frac{9Z}{5\Delta_{dp}^3} \cdot 0.089. \quad (38)$$

Из сравнения выражений (37) и (38) следует неравенство  $C \gg F$ , которое объясняет корреляцию полученных результатов с результатами вычислений

параметра  $D_2$  методом DFT [13]. В [13] отмечалось, что для получения необходимого значения параметра одноосной анизотропии необходимо, чтобы  $\lambda_d$  и  $\lambda_p$  были отличны от нуля.

В нашем случае при  $\lambda_p = 0$  параметр одноосной анизотропии определяется выражением  $D_2 = -F\lambda_d^2$ . Поскольку величина  $F$  относительно мала, необходимое значение  $D_2$  возникает лишь при больших значениях  $\lambda_d$ .

Иная ситуация складывается при  $\lambda_p \neq 0$ , когда включается второе слагаемое в (33). Поскольку  $C \gg F$ , нужное значение параметра  $D_2$  даже при сравнительно небольших  $\lambda_p$  достигается при значительно меньших значениях  $\lambda_d$ .

Проведенный анализ аналитических выражений полностью соответствует результатам работы [13], а также представленным выше графикам, определяющим зависимости  $D_2$  от  $\lambda_p$  и  $\lambda_d$ , которые были получены на основе численных расчетов без использования отмеченного выше разложения в ряд. Отметим также, что полученные аналитические формулы позволили детально проследить за влиянием параметров спин-орбитальной связи на область реализации анизотропии типа «легкая ось» и «легкая плоскость».

Следует подчеркнуть, что значения величин  $F$  и  $C$  в (33) существенно зависят от интегралов перескоков, которые в свою очередь меняются при изменении геометрического расположения ионов по отношению друг к другу.

Полученные результаты позволяют говорить о возможности более широкого применения предложенного флуктуационного механизма формирования ОА в диэлектриках с магнитоактивными ионами, находящимися в состоянии орбитального синглета.

## 9. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложенный в работе флуктуационный механизм одноионной анизотропии в АФМ ТИ  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  основан на использовании следующих положений.

1. Состояниям с номинальной валентностью ионов  $\text{Mn}^{2+}$  и  $\text{Te}^{2-}$  отвечают электронные конфигурации  $3d^5$  и  $5p^6$  с термами  ${}^6S$  и  ${}^0S$  соответственно. При этом терм  ${}^6S$  шестикратно вырожден.

2. Перескоки электронов между ионами  $\text{Te}$  и  $\text{Mn}$  инициируют зарядовые флуктуации. В результате возникает примешивание к состояниям основных термов отмеченных ионов состояний возбужденных термов с не равными нулю орбитальными моментами.

3. Для учета этих процессов применена операторная форма теории возмущений с привлечением атомного представления, позволяющего записать мультиплетные состояния в диагональном виде. Во втором порядке теории возмущений получен эффективный гамильтониан, в котором частичное снятие вырождения термина  ${}^6S$  соответствует возникновению одноионной анизотропии.

4. При использовании малого параметра получены простые аналитические выражения, описывающие зависимость константы одноионной анизотропии от параметров спин-орбитальных взаимодействий для ионов Те и Мп.

5. Важными для применений оказалось то, что интервал значений константы анизотропии, возникающий при варьировании исходных параметров модели, включает то значение  $D_2$ , которое требуется для интерпретации экспериментальных данных по спин-флоп-переходу в  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ .

6. Рассмотренный в работе флуктуационный механизм ОА принципиально не ограничивается применением только для  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ , а может быть очевидным образом адаптирован для других соединений, содержащих магнитоактивные ионы с орбитальным синглетом в качестве основного термина.

**Финансирование.** Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда № 23-22-10021, <https://rscf.ru/project/23-22-10021/> и Красноярского краевого фонда науки.

## ЛИТЕРАТУРА

1. М. М. Отроков, И. И. Klimovskikh, Н. Bentmann et al. (Collaboration), *Nature* **576**, 416 (2019).
2. J.-Q. Yan, Q. Zhang, T. Heitmann et al., *Phys. Rev. Mater.* **3**, 064202 (2019).
3. Y.-J. Hao, P. Liu, Y. Feng et al. (Collaboration), *Phys. Rev. X* **9**, 041038 (2019).
4. B. Li, J.-Q. Yan, D. M. Pajerowski et al., *Phys. Rev. Lett.* **124**, 167204 (2020).
5. Дж. Гудинаф, *Зонная структура переходных d-металлов и их сплавов*, Изд-во иностр. лит-ры, Москва (1963).
6. В. В. Еременко, *Введение в оптическую спектроскопию*, Наукова думка, Киев (1975).
7. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, Наука, Москва (1989).
8. J.-Q. Yan, S. Okamoto, M. A. McGuire, A. F. May, R. J. McQueeney, and B. C. Sales, *Phys. Rev. B* **100**, 104409 (2019).
9. Y. Lai, L. Ke, J. Yan, R. D. McDonald, and R. J. McQueeney, *Phys. Rev. B* **103**, 184429 (2021).
10. S. Li, T. Liu, C. Liu, Y. Wang, H.-Z. Lu, and X. C. Xie, *Natl. Sci. Rev.* **11**, nvac296 (2023).
11. К. Бальхаузен, *Введение в теорию поля лигандов*, Мир, Москва (1964).
12. С. А. Альтшулер, Б. М. Козырев, *Электронный парамагнитный резонанс соединений элементов переходных групп*, Наука, Москва (1972).
13. Y. Li, Z. Jiang, J. Li, S. Xu, and W. Duan, *Phys. Rev. B* **100**, 134438 (2019).
14. J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. Lond. A* **285**, 542 (1965).
15. Н. Н. Боголюбов, *Статистическая механика*, т. VI, Наука, Москва (1989).
16. N. Marzari, A. A. Mostofi, J. R. Yates, I. Souza, and D. Vanderbilt, *Rev. Mod. Phys.* **84**, 1419 (2012).
17. G. Pizzi, V. Vitale, R. Arita et al. (Collaboration), *J. Phys.: Condens. Matter* **32**, 165902 (2020).
18. J. Li, Y. Li, S. Du et al., *Sci. Adv.* **5**, eaaw5685 (2019).
19. S. Xiao, X. Xiao, F. Zhan, J. Fan, X. Wu, and R. Wang, *Phys. Rev. B* **105**, 125126 (2022).
20. Q. Sh. Wu, Sh. N. Zhang, H.-F. Song, M. Troyer, and A. A. Soluyanov, *Comput. Phys. Commun.* **224**, 405 (2018).
21. R. Gao, G. Qin, S. Qi, Z. Qiao, and W. Ren, *Phys. Rev. Mater.* **5**, 114201 (2021).
22. W.-T. Guo, Z. Huang, and J.-M. Zhang, *Rashba Spin-Splitting Driven Inverse Spin Hall Effect in  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$* , *Commun. Phys.* **8**, 1 (2025).
23. T. Zhu, H. Wang, H. Zhang, and D. Xing, *Npj Comput. Mater.* **7**, 1 (2021).
24. J. Li, J. Y. Ni, X. Y. Li, H.-J. Koo, M.-H. Whangbo, J. S. Feng, and H. J. Xiang, *Phys. Rev. B* **101**, 201408 (2020).
25. A. H. Wilson, *Proc. Roy. Soc. Lond. A* **133**, 458 (1931).
26. K. W. H. Stewens, *Proc. Phys. Soc. A* **65**, 209 (1952).
27. А. К. Звездин, В. М. Матвеев, А. А. Мухин, А. И. Попов, *Редкоземельные ионы в магнитоупорядоченных кристаллах*, Наука, Москва (1985).
28. В. В. Вальков, А. О. Злотников, А. Гамов, *Письма в ЖЭТФ* **118**, 330 (2024).