

УДК 538.94

ЭЛЕКТРОННЫЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ ДИРАКОВСКОГО ПОЛУМЕТАЛЛА Cd_3As_2 , ЛЕГИРОВАННОГО АТОМАМИ Mn С ВАРЬИРУЕМОЙ КОНЦЕНТРАЦИЕЙ

© 2023 г. Э. Т. Кулатов^{1,2,*}, Ю. А. Успенский^{2,**}

Представлено академиком РАН И.А. Щербаковым 26.12.2022 г.

Поступило 06.02.2023 г.

После доработки 06.02.2023 г.

Принято к публикации 04.05.2023 г.

Теоретические исследования предсказывают, что слабое магнитное легирование дираковских полуметаллов ведет к появлению в них необычных квантовых состояний и свойств: состояния вейлевского полуметалла, аксионного изолятора, топологического сверхпроводника и т.д. Однако конкретные материалы, в которых эти явления могут наблюдаться, а также характерные концентрации магнитных атомов остаются пока неизвестными. В настоящей работе выполнено первопринципное исследование электронных и магнитных свойств дираковских полуметаллов Cd_3As_2 , изоэлектронно легированного атомами Mn с концентрациями 4, 6 и 8%. При анализе результатов основное внимание уделено нарушению пространственной и временной симметрии в сплавах, поведению электронного спектра вблизи вершины дираковского конуса, процессам спинового упорядочения в атомах Mn . Полученные результаты сопоставлены с ранними теоретическими и экспериментальными исследованиями, на их основе дана развернутая картина влияния изоэлектронного магнитного легирования на свойства дираковских полуметаллов Cd_3As_2 .

Ключевые слова: полуметаллы Дирака, спинтроника, топотроника, электронная структура

DOI: 10.31857/S2686740023050061, **EDN:** OVJMRW

Топологические полуметаллы привлекают большое внимание исследователей своими необычными свойствами: своеобразной (обычно линейной) дисперсией электронного спектра, нетривиальными краевыми электронными состояниями и, нередко, электронным транспортом, защищенным от влияния примесей и дефектов [1–3]. Эти свойства открывают возможности для практического использования топологических полуметаллов во многих приложениях, в частности, в широкополосных инфракрасных фотодетекторах, устройствах спинтроники, квантовых компьютерах, лазерах терагерцового диапазона и т.д. [4–7]. Для разрабатываемых устройств такого ро-

да был предложен даже специальный термин — топотроника (топологическая электроника).

Наличие этих необычных электронных и транспортных свойств тесно связано с симметрией кристалла. Так, в дираковских полуметаллах четырехкратное вырождение спектра в конической точке и двукратное на самом конусе обусловлены существованием центра инверсии и симметрией по отношению к обращению времени (TR -симметрией). Отсутствие одного из этих двух элементов симметрии превращает дираковский полуметалл в полуметалл вейлевского типа, у которого остаются только линейный закон дисперсии и двукратное вырождение спектра в особой точке. Такое понижение симметрии может достигаться либо переходом к кристаллической структуре, не имеющей центра инверсии, либо использованием магнитного кристалла с центром инверсии. И в том и в другом случае электронная структура должна оставаться полуметаллической, поскольку выход на уровень Ферми дополнитель-

¹Институт общей физики им. А.М. Прохорова
Российской академии наук, Москва, Россия

²Физический институт им. П.Н. Лебедева
Российской академии наук, Москва, Россия

*E-mail: kulatov@nsc.gpi.ru

**E-mail: uspenski@td.lpi.ru

ных зон может сильно затруднить наблюдение тонких топологических эффектов.

Соединение Cd_3As_2 относится к числу наиболее популярных дираковских полуметаллов. Его низкотемпературная тетрагональная α -фаза имеет структуру, относящуюся к пространственной группе $I4_1/acd$ (группа № 142) [8]. Наличие в этом соединении полуметаллической электронной структуры дираковского типа было подтверждено измерениями осцилляций Шубникова—де Гааза [9], фотоэмиссионных спектров с угловым разрешением [10, 11], сканирующей туннельной спектроскопии [12] и расчетами теории функционала плотности (ТФП) [13]. Было найдено, что в зоне Бриллюэна Cd_3As_2 имеются два конуса Дирака с вершинами, расположенными симметрично относительно точки Γ на оси Γ – Z . Скорость электронов на уровне Ферми в Cd_3As_2 , определяемая линейным законом дисперсии на конусе Дирака, очень высока и составляет по экспериментальным и ТФП-оценкам примерно 1.1×10^6 – 1.3×10^6 м/с [11, 14]. Благодаря высокой скорости уровень Ферми (E_F) легко сдвигается даже при небольшом легировании, обусловленном неконтролируемыми дефектами. Так, при концентрации носителей n -типа, равной 1×10^{18} см $^{-3}$, сдвиг E_F составляет около 0.05 эВ [14]. Наличие в образцах Cd_3As_2 неконтролируемых носителей заряда проявляется в инфракрасных спектрах отражения как появление плазменного края отражения фотонов с энергией 0.03–0.05 эВ [15, 16], что полностью согласуется с первопринципными расчетами оптических свойств [14].

Наиболее простым способом нарушения TR -симметрии в Cd_3As_2 является легирование этого соединения магнитными атомами. В качестве легирующего элемента лучше всего подходит марганец, так как в случае замещения атомов Cd на Mn имеет место изоэлектронное легирование, при котором число валентных электронов и положение уровня Ферми не изменяются. Измерения магнитотранспортных свойств, выполненные на образцах $(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x)_3\text{As}_2$ с $x = 0, 0.017$ и 0.033 [17, 14], показали, что с повышением концентрации Mn происходит смена знака магнитопроводимости с отрицательного ($x = 0$ и 0.017) на положительный ($x = 0.033$). Согласно первопринципным исследованиям [14], атомы Mn в $(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x)_3\text{As}_2$ при $x = 0.04$ имеют тенденцию к кластеризации и стремятся к антиферромагнитному упорядочению своих спинов. При этой концентрации электронный спектр все еще имеет преимущественно линейный характер, хотя на уровне Ферми открывается щель шириной около 0.02 эВ. Следует отметить, что ширина щели в работе [14] несколько варьируется в зависимости от выбранного расположения магнитных атомов в сверхъядерке на узлах Cd, хотя в среднем, в очень больших сверхъ-

ячейках, включающих много различных конфигураций атомов Mn, эти вариации должны стремиться к нулю. В этой связи возникает вопрос, как далеко по концентрации в сплавах $(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x)_3\text{As}_2$ простирается преимущественно линейный закон дисперсии в окрестности уровня Ферми и сохраняется доминирование антиферромагнитного спинового порядка. Фактически речь идет об области концентраций, в которой электронные, магнитные, оптические и транспортные свойства $(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x)_3\text{As}_2$ остаются относительно стабильными или изменяются вполне регулярным образом. Чтобы ответить на этот вопрос, в настоящей работе были вычислены электронная структура и спиновое упорядочение в сплавах $(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x)_3\text{As}_2$ с $x = 0, 0.04, 0.06$ и 0.08 . Для сравнения результатов, полученных для разных концентраций, все расчеты производились в одной и той же сверхъядерке Cd_3As_2 , содержащей 96 атомов Cd и 64 атома As.

1. МЕТОДЫ РАСЧЕТА ЭЛЕКТРОННОЙ И СПИНОВОЙ СТРУКТУРЫ

Вычисление электронной структуры производилось с помощью программного пакета VASP [18], использующего базис плоских волн и описание атомных потенциалов методом псевдопотенциала. Более точно, в расчетах использовались: разложение волновой функции по плоским волнам с энергией обрезания 500 эВ, стандартные PAW-потенциалы метода VASP [18] и обобщенное градиентное приближение для обменно-корреляционного потенциала (GGA) [19]. Чтобы правильно описать тонкие детали электронной структуры вблизи уровня Ферми, расчеты производились с учетом релятивистских эффектов, включая спин-орбитальное взаимодействие в рамках второй вариационной процедуры. Равновесные положения атомов определялись стандартной итерационной процедурой релаксации с точностью до 1×10^{-4} эВ по полной энергии и с точностью до 5×10^{-3} эВ/Å по величине сил, действующих на атомы. Легирование атомами Mn моделировалось с помощью сверхъядерки $\text{Cd}_{96}\text{As}_{64}$, отвечающей низкотемпературной α -фазе Cd_3As_2 (рис. 1а). Распределение атомов Mn по подрешетке Cd производилось случайным образом, используя открытый код VASPKIT [20]. Единственным исключением была концентрация $x = 0.04$, уже исследованная нами ранее в работе [14]. При этой концентрации атомы Mn были распределены в плоскости XY, что позволило получить новую информацию об электронной структуре по сравнению с [14].

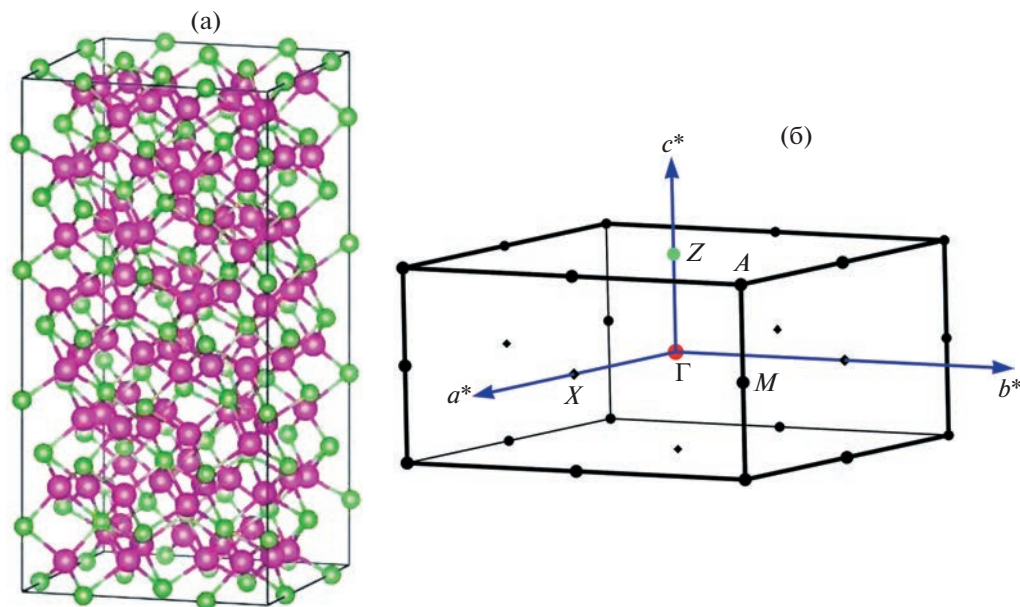


Рис. 1. Элементарная ячейка (а) и зона Бриллюэна (б) соединения Cd_3As_2 , использованные в наших расчетах. Атомы Cd – розового цвета, атомы As – зеленого.

2. КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ И ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА СОЕДИНЕНИЯ Cd_3As_2

Для удобства моделирования сплавов $(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x)_3\text{As}_2$ с варьируемым содержанием марганца сверхъячейка α -фазы соединения Cd_3As_2 была выбрана большой, содержащей 160 атомов Cd и As, что в 2 раза больше примитивной ячейки этой фазы (рис. 1а). В данной структуре ближайшими соседями атомов Cd являются атомы As, а ближайшими соседями As – атомы Cd. Ближайшие друг к другу атомы Cd, принадлежащие к одному горизонтальному слою, разделены расстоянием $d_{xy} = 3.29 \text{ \AA}$, тогда как минимальное расстояние между атомами Cd из соседних слоев немного меньше ($d_z = 3.21 \text{ \AA}$). При нашем выборе сверхъячейки зона Бриллюэна (ЗБ) имеет форму прямоугольного параллелепипеда (рис. 1б). При построении зонной структуры вдоль каждого симметричного направления ЗБ использовался набор из 30 $\mathbf{k}$ -точек, что дает шаг по $\mathbf{k}$ в 3–5 раз меньше, чем в нашей ранней работе [14].

Рассчитанная зонная структура Cd_3As_2 вдоль 5 симметричных направлений ЗБ представлена на рис. 2а. Рисунок 2б показывает в более крупном масштабе электронный спектр в окрестности уровня Ферми (E_F). Наиболее примечательной особенностью спектра является наличие конуса Дирака, имеющего вершину в точке ЗБ $k_D = (0, 0, 0.04 \text{ \AA}^{-1})$. Второй конус Дирака имеет вершину в точке $-k_D = (0, 0, -0.04 \text{ \AA}^{-1})$ (на рис. 2а не показана). В точке Γ оба конуса сливаются (точка Лифшица). Поскольку зоны, пересекающиеся в точке

Дирака, принадлежат к разным представлениям группы C_{4v} (Λ_6 и Λ_7), четырехкратное вырождение, вызванное пересечением зон, оказывается нечувствительно к малым вариациям кристаллического потенциала. По направлению от k_D к точке Z спектр имеет линейный характер, который сохраняется вплоть до энергии $E = 0.4 \text{ эВ}$. Скорость электронов на этом участке очень велика $1.1 \times 10^6 \text{ м/с}$, что хорошо согласуется со скоростью $1.3 \times 10^6 \text{ м/с}$, найденной из измерений ARPES [11]. В других направлениях от точки Дирака скорость электронов несколько меньше, а спектр быстрее теряет линейный характер.

3. ЭЛЕКТРОННЫЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СПЛАВОВ $(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x)_3\text{As}_2$

Легирование Cd_3As_2 марганцем ставит как минимум три вопроса: как атомы Mn распределяются на подрешетке Cd, какое спиновое упорядочение энергетически более выгодно – ферромагнитное (ФМ) или антиферромагнитное (АФМ) и какую валентность в данном сплаве проявляют атомы Mn. В работе [14] очень подробно, с помощью 9 различных конфигураций был изучен только один сплав $(\text{Cd}_{0.96}\text{Mn}_{0.04})_3\text{As}_2$. Эти расчеты показали, что в сверхъячейке $\text{Cd}_{46}\text{Mn}_2\text{As}_{32}$ два атома Mn имеют явную тенденцию к сближению, а АФМ-состояние выгоднее ФМ-состояния примерно на 0.15 эВ/Мн . В ФМ-состоянии величина спинового момента атомов близка к $5 \mu_B/\text{Мн}$, что означает полное заполнение $3d\uparrow$ -зоны марганца. Оставшиеся два электрона являются валентны-

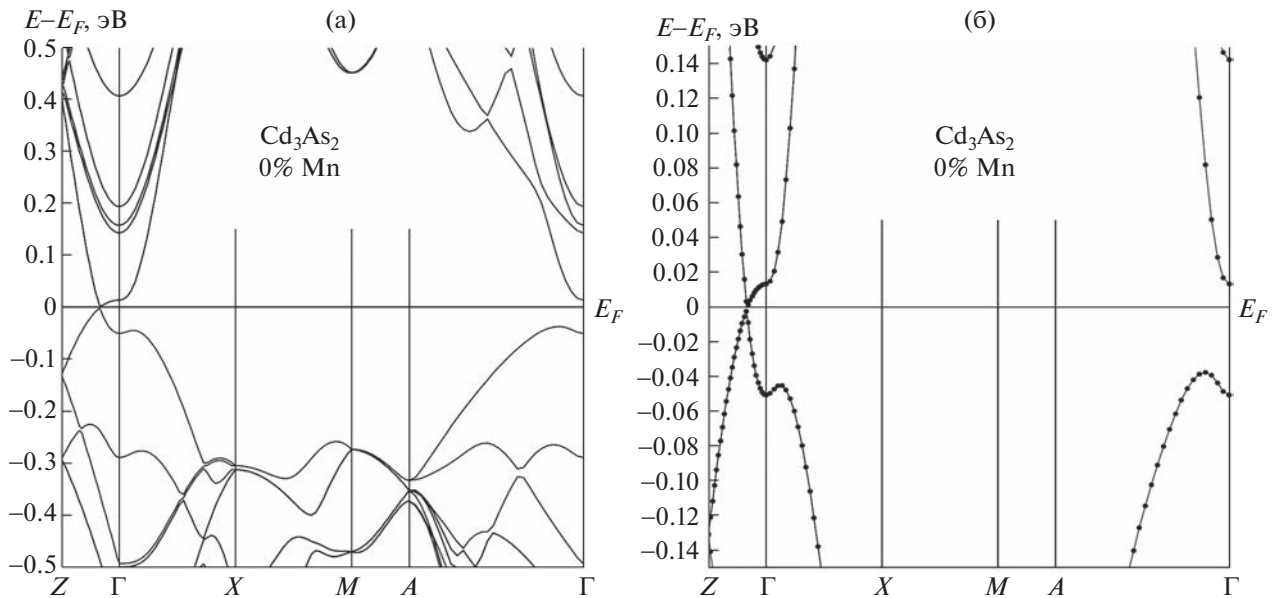


Рис. 2. Зонная структура соединения Cd_3As_2 : а — дисперсия зон в интервале энергий от -0.5 до $+0.5$ эВ (относительно E_F), б — дисперсия зон вблизи уровня Ферми.

ми, т.е. в ФМ-сплаве $(\text{Cd}_{0.96}\text{Mn}_{0.04})_3\text{As}_2$ имеет место замещение двухвалентного Cd на двухвалентный Mn (изоэлектронное легирование). В АФМ-состоянии локальный момент атома Mn также равен по абсолютной величине $5 \mu_B/\text{Mn}$, т.е. и в этом случае имеет место изоэлектронное легирование. В расчетах электронной структуры этот факт отражается в неизменном положении уровня Ферми в сплавах $(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x)_3\text{As}_2$, соответствующем энергии точки Дирака в Cd_3As_2 .

Результаты расчетов полной энергии и магнитных свойств сплавов $(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x)_3\text{As}_2$ с $x = 4, 6$ и 8% , выполненных в настоящей работе, представлены в табл. 1. Для сравнения в табл. 1 также включены данные по $(\text{Cd}_{0.96}\text{Mn}_{0.04})_3\text{As}_2$ [14] двух типов: для конфигурации с самой низкой энергией и усредненные по 4 низкоэнергетическим конфигурациям. Наши данные для $x = 4\%$ подтверждают тенденцию атомов Mn к кластеризации. Конфигурация с четырьмя близко расположенными атомами Mn (рис. 3а) имеет энергию на 0.035 эВ/Mn ниже, чем конфигурация из двух лучших димеров [14], и на 0.082 эВ/Mn ниже, чем усредненная конфигурация низкоэнергетических димеров [14]. Эти энергии вполне соизмеримы с температурами, используемыми при синтезе сплавов, поэтому в реальных образцах $(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x)_3\text{As}_2$ следует ожидать слабой кластеризации Mn, проявляющейся на фоне его случайного распределения на подрешетке Cd. По этой причине в нашем исследовании распределение Mn в сплавах с $x = 6\%$ и $x = 8\%$ моделировалось с помощью программы VASP KIT [20] как полностью случайное. Следует

отметить, что энергия замещения одного атома Cd на один атом Mn ($\Delta E_{\text{Cd-Mn}}$) несколько меняется с концентрацией: при $x = 4\%$ она равна -7.37 эВ/Mn, -8.04 эВ/Mn при 6% и -7.64 эВ/Mn при 8% . Общее увеличение $\Delta E_{\text{Cd-Mn}}$ с ростом x вполне ожидаемо, так как при больших концентрациях увеличивается доля более сильных Mn–As–Mn-взаимодействий. Максимальную величину $|\Delta E_{\text{Cd-Mn}}|$ при промежуточной концентрации объяснить труднее. Вероятно, она обусловлена какими-то особенностями нашей случайной конфигурации для $x = 6\%$ (рис. 3б).

Электронная структура сплава $(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x)_3\text{As}_2$ с $x = 4\%$ представлена на рис. 3а. Она, в целом, похожа на электронную структуру Cd_3As_2 , но отличается от нее рядом важных деталей. Во-первых, в точке Дирака снимается четырехкратное вырождение зон. В этой точке спектр расщепляется на 2 валентные зоны и 2 зоны проводимости, разделенные не прямой узкой щелью шириной около 0.014 эВ (рис. 3в). Это расщепление есть следствие введения магнитных атомов, ведущего к потере TR -симметрии и центра инверсии (последнее из-за несимметричного расположения атомов Mn в сверхъячейке). Во-вторых, по всей ЗБ снимается двукратное вырождение спектра, имевшее место в Cd_3As_2 . В АФМ-состоянии такое расщепление спектра связано с размещением Mn на неэквивалентных кристаллических позициях Cd, что приводит к небольшому различию в величинах спиновых моментов, локализованных на разных узлах. Как было объяснено в работе [14], этот эффект является искусственным: в реальных

Таблица 1. Термодинамические, магнитные и спектральные характеристики сплавов $(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x)_3\text{As}_2$ с разной концентрацией марганца

$x(\text{Mn})$	E_{AFM} , эВ/яч	$E_{AFM} - E_{FM}$, эВ/яч	M_{tot} , $\mu_B/\text{яч}$		E_g , эВ	ΔE , эВ
			АФМ	ФМ		
4% [14], min/aver	417.0638/–416.8764	–0.686/–0.650	~0/0	19.9/19.9	0.028/0.043	0.006/0.015
4%	–417.2035	–1.224	~0	19.2	0.024	0.005
6%	–435.9549	–0.105	~0	29.9	0.015	0.004
8%	–448.8234	–0.786	~0	39.8	0.031	0.012

E_{AFM} – энергия АФМ-состояния, $E_{AFM} - E_{FM}$ – разность энергий АФМ- и ФМ-состояний, M_{tot} – магнитный момент ячейки АФМ/ФМ-состояния, E_g – ширина запрещенной зоны при нулевом спиновом расщеплении, ΔE – спиновое расщепление зон вблизи E_F . Для данных [14] приведены минимальные и усредненные по конфигурациям значения величин.

сплавах усреднение по всем конфигурациям снижает данное расщепление спектра. Имея это в виду, энергетическая щель в окрестности точки Дирака была определена нами без учета расщепления, что дало $E_g = 0.024$ эВ (табл. 1). Приведенная в табл. 1 величина $\Delta E = 0.005$ эВ показывает, насколько сильно спектр вблизи точки Дирака для данной конфигурации отличается от своего среднего по конфигурациям значения. Еще раз подчеркнем, что введение 4% Mn приводит к очень небольшим изменениям в спектре. Наиболее важное из них – появление щели в точке Дирака. Заметные изменения в спектре валентной зоны в направлении Г–Х в значительной степени связаны со спиновым расщеплением спектра, присущим данной конфигурации, и должны многократно уменьшиться после усреднения спектра по конфигурациям.

Использованная нами для $(\text{Cd}_{0.94}\text{Mn}_{0.06})_3\text{As}_2$ конфигурация атомов Mn (рис. 3б) имеет самую низкую среди рассмотренных сплавов энергию замещения $\Delta E_{\text{Cd-Mn}} = -8.04$ эВ/Mn. Вместе с тем разность энергий ФМ- и АФМ-состояний этого сплава – самая маленькая по абсолютной величине: $E_{AFM} - E_{FM} = -0.017$ эВ/Mn. Скорее всего, последний факт объясняется тем, что в данной конфигурации атомы $\text{Mn}\uparrow$ отделены от атомов $\text{Mn}\downarrow$ сравнительно большими расстояниями (рис. 3б). Возможно, что та же особенность приводит к самой маленькой среди рассмотренных сплавов величине щели $E_g = 0.015$ эВ и спинового расщепления спектра $\Delta E = 0.004$ эВ. Следует также отметить для данного сплава очень низкую дисперсию двух верхних ветвей валентной зоны, имеющую место между точкой Дирака и точкой Z зоны Бриллюэна (рис. 3б).

По своим характеристикам сплав $(\text{Cd}_{0.92}\text{Mn}_{0.08})_3\text{As}_2$ ($x = 8\%$, рис. 3в) не очень сильно отличается от остальных сплавов, представленных в табл. 1. В целом он оказывается ближе к сплаву с $x = 4\%$, чем с $x = 6\%$. Его электронная

структура характеризуется теми же особенностями, что и у сплава $(\text{Cd}_{0.96}\text{Mn}_{0.04})_3\text{As}_2$, но отличается несколько более широкой щелью $E_g = 0.031$ эВ и большим спиновым расщеплением вблизи уровня Ферми $\Delta E = 0.012$ эВ. Можно отметить также общий для всех сплавов подъем валентной зоны вдоль направления Х–М ЗБ по сравнению с чистым соединением Cd_3As_2 . Для $x = 4\%$ этот подъем составляет примерно 0.13 эВ, для 6% – 0.12 эВ, для 8% – 0.16 эВ. Наиболее вероятная причина этого эффекта – усиливающаяся с ростом x гибридизация орбиталей As 4p- с примесными Mn 3d-орбиталями, имеющими характерную энергию $E_{\text{Mn-3d}} \approx -3$ эВ.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполненные нами расчеты дираковских полуметаллов Cd_3As_2 и сплавов $(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x)_3\text{As}_2$ с $x = 0.04, 0.06$ и 0.08 показали, что изоэлектронное замещение Cd магнитными атомами Mn имеет ряд характерных особенностей, слабо изменяющихся с концентрацией. Во-первых, во всех изученных сплавах самой низкой энергии отвечает АФМ-упорядочение спинов, хотя разность энергий $E_{AFM} - E_{FM}$ варьируется очень широко, от -0.02 до -0.31 эВ/Mn. Во-вторых, атомы Mn проявляют хорошо заметную тенденцию к кластеризации. Однако типичный выигрыш в энергии от их сближения имеет весьма умеренную величину порядка 0.05 эВ/Mn и вряд ли может превалировать над случайным разбросом Mn по подрешетке Cd в процессе сплавления. В-третьих, магнитное легирование сопровождается снятием четырехкратного вырождения в точке Дирака и образованием узкой щели, разделяющей валентную зону и зону проводимости. В настоящих расчетах ширина щели меняется от 0.015 до 0.031 эВ, причем эти изменения не являются монотонными, а сильно зависят от конкретного расположения атомов Mn. Следует отметить, что тонкие детали электрон-

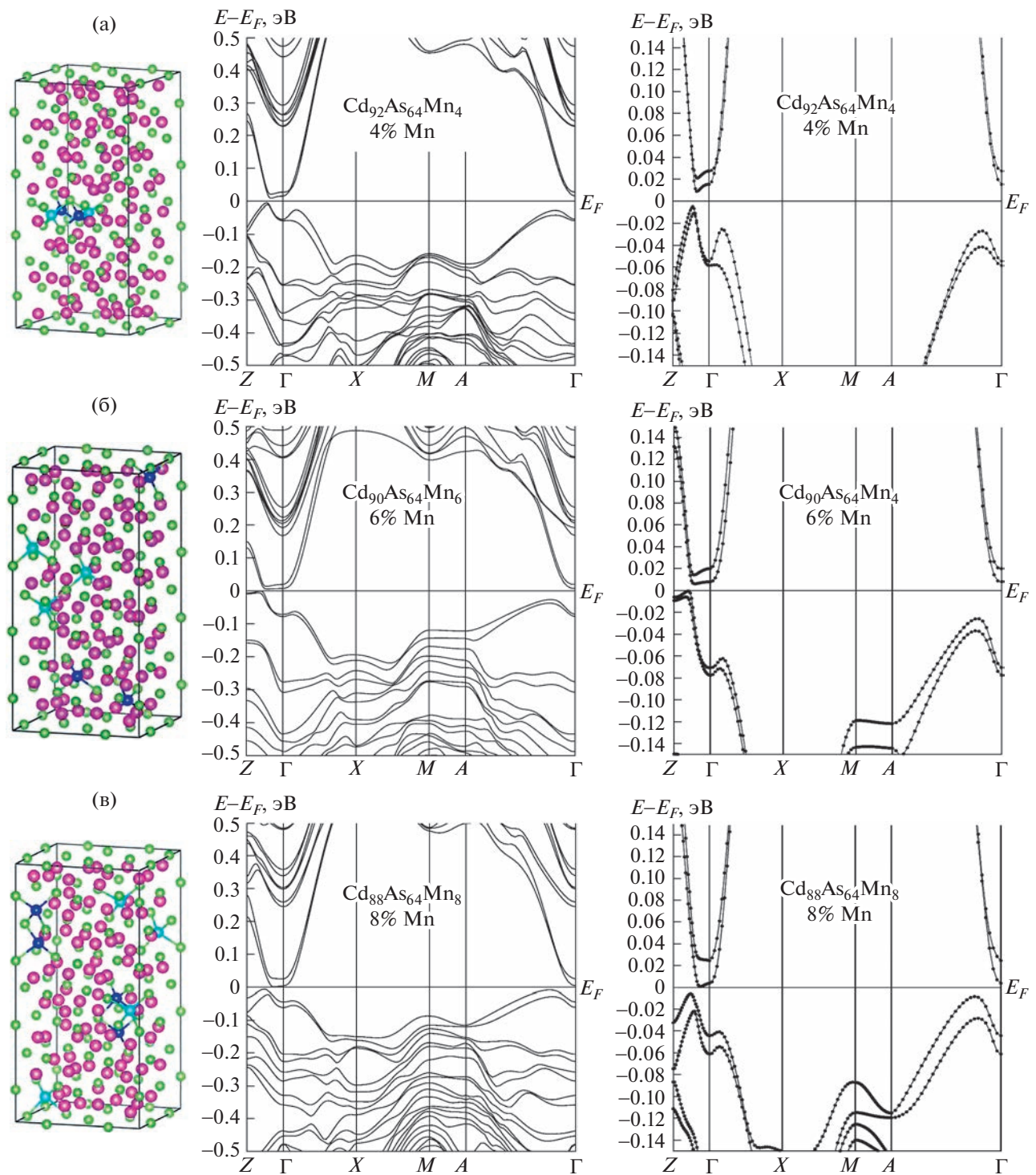


Рис. 3. Кристаллическая структура, зонная структура и электронная структура вблизи E_F (соответственно) в сплаве $(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x)_3\text{As}_2$ с $x = 0.04$ (а), $x = 0.06$ (б), $x = 0.08$ (в). Синим цветом показаны атомы Mn со спином вверх, голубым — со спином вниз.

ной структуры вблизи уровня Ферми вообще очень чувствительны к конкретному расположению атомов Mn, определяющему, в свою очередь, детали АФМ-ориентации спинов в сверхъячейке сплава. Вместе с тем основные черты электрон-

ного спектра в более широкой полосе энергий от -0.1 до $+0.4$ эВ (относительно E_F) меняются очень слабо с увеличением легирования. Эта ситуация заметно отличается от той, что имеет место при легировании трехмерного топологического

изолятора Bi_2Se_3 магнитными атомами переходных металлов [21, 22]. По этой причине при экспериментальном изучении сплавов $(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x)_3\text{As}_2$ желательнее использовать те методы, которые тесно связаны с возбуждением электронов вблизи уровня Ферми (ARPES высокого разрешения, магнито-транспортные свойства, оптика и магнитооптика далекого ИК-диапазона и т.д.). Высокая чувствительность электронного спектра сплавов $(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x)_3\text{As}_2$ в узком слое вблизи E_F может представлять интерес для разработки устройств терагерцового диапазона, таких как сенсоры и лазеры с большой длиной волны.

БЛАГОДАРНОСТИ

Авторы выражают благодарность Межведомственному суперкомпьютерному центру Российской академии наук за предоставление суперкомпьютерных ресурсов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Armitage N.P., Mele E.J., Vishvanath A. Weyl and Dirac semimetals in three-dimensional solids // *Rev. Mod. Phys.* 2018. V. 90. №. 1. P. 015001–015057.
2. Wang S., Lin B.C., Wang A.Q., Yu D.P., Liao Z.M. Quantum Transport in Dirac and Weyl Semimetals: A Review // *Adv. Phys.*: X. 2017. V. 2. P. 518–544.
3. Burkov A.A. Topological Semimetal // *Nat. Mater.* 2016. V. 15. P. 1145–1148.
4. Wang A.-Q., Ye X.-G., Yu D.-P., Liao Z.M. Topological semimetal nanostructures: from properties to topotronics // *ACS Nano*. 2020. V. 14. P. 3755–3778.
5. Liu P., Williams J.R., Cha J.J. Topological Nanomaterials // *Nat. Rev. Mater.* 2019. V. 4. P. 479–496.
6. Wang L.X., Li C.Z., Yu D.P., Liao Z.M. Aharonov-Bohm Oscillations in Dirac Semimetal Cd_3As_2 Nanowires // *Nat. Commun.* 2016. V. 7. P. 10769–10775.
7. Yu W., Pan W., Medlin D.L., Rodriguez M.A., Lee S.R., Bao Z.Q., Zhang F. π and 4π Josephson Effects Mediated by a Dirac Semimetal // *Phys. Rev. Lett.* 2018. V. 120. P. 177704–177709.
8. Ali M.N., Gibson Q., Jeon S., Zhou B.B., Yazdani A., Cava R.J. The crystal and electronic structures of Cd_3As_2 , the three-dimensional electronic analogue of graphene // *Inorg. Chem.* 2014. V. 53. P. 4062–4067.
9. He L.P., Hong X.C., Dong J.K., Pan J., Zhang Z., Zhang J., Li S.Y. Quantum transport evidence for the three-dimensional Dirac semimetal phase in Cd_3As_2 // *Phys. Rev. Lett.* 2014. V. 113. P. 246402–246406.
10. Neupane M., Xu S.-Y., Sankar R., Alidoust N., Bian G., Liu C., Belopolski I., Lin H., Bansil A., Chou F., Hasan M.Z., Chang T.-R., Jeng H.-T. Observation of a three-dimensional topological Dirac semimetal phase in high-mobility Cd_3As_2 // *Nat. Commun.* 2014. V. 5. P. 3786–3793.
11. Liu Z.K., Jiang J., Zhou B., Wang Z.J., Zhang Y., Weng H.M. *et al.* A stable three-dimensional topological Dirac semimetal Cd_3As_2 // *Nat. Mater.* 2014. V. 13. P. 677–681.
12. Jeon S., Zhou B.B., Gyeon A., Feldman B.E., Kimchi I., Potter A.C., Gibson Q.D., Cava R.J. Landau quantization and quasiparticle interference in the three-dimensional Dirac semimetal Cd_3As_2 // *Nat. Mater.* 2014. V. 13. P. 851–856.
13. Wang Z., Weng H., Wu Q., Dai X., Fang Z. Three-dimensional Dirac semimetal and quantum transport in Cd_3As_2 // *Phys. Rev. B*. 2013. V. 88. P. 125427–125432.
14. Kulatov E.T., Uspenskii Yu.A., Oveshnikov L.N., Mekhriya A.B., Davydov A.B., Ril' A.I., Marenkin S.F., Aronzon B.A. Electronic, magnetic and magnetotransport properties of Mn-doped Dirac semimetal Cd_3As_2 // *Acta Materialia*. 2021. V. 219. P. 117249–117258.
15. Akrap A., Hakl M., Tchoumakov S., Crassee I., Kuba J., Goerbig M.O. *et al.* Magneto-optical signature of massless Kane electrons in Cd_3As_2 // *Phys. Rev. Lett.* 2016. V. 117. P. 136401–136406.
16. Neubauer D., Carbotte J.P., Nateprov A.A., Löhle A., Dressel M., Pronin A.V. Interband optical conductivity of the [001]-oriented Dirac semimetal Cd_3As_2 // *Phys. Rev. B*. 2016. V. 93. P. 121202–121206.
17. Oveshnikov L.N., Davydov A.B., Suslov A.V., Ril' A.I., Marenkin S.F., Vasiliev A.L., Aronzon B.A. Superconductivity and Shubnikov-de Haas effect in polycrystalline Cd_3As_2 thin films // *Sci. Rep.* 2020. V. 10. P. 4601–4607.
18. Kresse G., Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab initio total energy calculations using a plane-wave basis set // *Phys. Rev. B*. 1996. V. 54 (16). P. 11169–11186.
19. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple // *Phys. Rev. Lett.* 1996. V. 77 (18). P. 3865–3868.
20. Wang V., Xu N., Liu J.C., Tang G., Geng W.T. VASPKIT: A User-Friendly Interface Facilitating High-Throughput Computing and Analysis Using VASP Code // *Computer Physics Communications*. 2021. V. 267. P. 108033–108051.
21. Kulatov E.T., Men'shov V.N., Tugushev V.V., Uspenskii Yu.A. Electron and magnetic properties of three-dimensional magnetic topological insulators Bi_2Se_3 :Cr and Bi_2Se_3 :Fe // *Europhysics Letters*. 2016. V. 115. P. 67004–67010.
22. Kulatov E.T., Men'shov V.N., Tugushev V.V., Uspenskii Yu.A. Features of the electronic structure of the Bi_2Se_3 topological insulator digitally doped with 3d transition metals // *JETP Letters*. 2019. V. 109. P. 102–108.

ELECTRONIC AND MAGNETIC PROPERTIES OF ALLOYS BASED ON THE DIRAC SEMIMETAL Cd_3As_2 DOPED BY Mn ATOMS WITH THE VARIABLE CONCENTRATIONS

E. T. Kulatov^{a,b} and Yu. A. Uspenskii^b

^a*Prokhorov General Physics Institute of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

^b*Lebedev Physical Institute of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

Presented by Academician of the RAS I. A. Shcherbakov

Theoretical studies predict that the low magnetic doping of the Dirac semimetals (DS) leads to the appearance in them of unusual quantum states and properties: the states of Weil semimetals, axionic insulator, topological superconductor and so on. However the specific materials in which these phenomena can be observed, as well as the characteristic concentrations of magnetic atoms are still unknown. In the present work, an ab initio study of the electronic and magnetic properties of the DS Cd_3As_2 doped isoelectronically with Mn atoms at concentrations of 4, 6, and 8% was performed. When analyzing the results, the main attention is paid to breaking spatial and time reversal symmetry in alloys, the behavior of the electronic structure near the top of the Dirac cone, and the processes of spin ordering in Mn atoms. The results obtained are compared with earlier theoretical and experimental studies, and on their basis a detailed picture of the effect of isoelectronic magnetic doping on the properties of the DS Cd_3As_2 is given.

Keywords: Dirac semimetals, spintronics, topotronics, electronic structure