

ИЗУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ АНТИФЕРРОМАГНИТНОГО ТОПОЛОГИЧЕСКОГО ИЗОЛЯТОРА FeBi_2Te_4

Макеев Р.В.¹, Тарасов А.В.¹, Шикин А.М.¹

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург,
Россия

e-mail: st085767@student.spbu.ru, тел.: +7 (939) 3199053

Топологические изоляторы (ТИ) представляют собой класс квантовых материалов с уникальной электронной структурой, которая демонстрирует такие фундаментальные эффекты, как квантовый аномальный и спиновый эффекты Холла [1][2]. В данной работе исследуется электронная структура антиферромагнитного ТИ FeBi_2Te_4 , состоящего из семислойников [3] типа $\text{Te-Bi-Te-Fe-Te-Bi-Te}$, где магнитные атомы в соседних блоках ориентированы в противоположные стороны. Это обуславливает антиферромагнитные свойства материала и его анизотропию. Основное внимание уделено сравнению FeBi_2Te_4 с аналогичным материалом MnBi_2Te_4 [3][4], особенно с точки зрения ширины энергетической запрещенной зоны (ЭЗЗ) и локализации топологических поверхностных состояний (ТПС).

Для моделирования электронной структуры применялась теория функционала плотности (ТФП). В расчетах анализировалось, как замена атомов Fe на Mn (и наоборот) влияет на электронную структуру и локализацию ТПС.

Результаты расчетов показали, что в обоих материалах наблюдается инверсия зон в окрестности точки Γ и, несмотря на меньший магнитный момент атомов Fe по сравнению с Mn, ширина ЭЗЗ в FeBi_2Te_4 оказалась больше. Это можно объяснить значительным вкладом магнитной d-орбитали атомов Fe в формирование верхнего дираковского конуса, что оказывает влияние на ширину ЭЗЗ. Наблюдаемая инверсия зон в объемной структуре, а также формирование поверхностных состояний внутри запрещенной зоны позволяют заключить, что в электронной структуре присутствуют топологические поверхностные состояния (ТПС). Исследование спиновой текстуры показало, что спин электрона меняет поляризацию с внутриспослойной на внеплоскостную вблизи Γ -точки, где нарушается симметрия обращения времени. Такая спиновая поляризация характерна для ТПС в магнитных ТИ. Дополнительно, исследования показали, что при растяжении в FeBi_2Te_4 могут быть индуцированы фазы вейлевского и дираковского полуметаллов [5], что не наблюдается в случае MnBi_2Te_4 .

Результаты данного исследования демонстрируют значительное влияние локализации ТПС на различия в электронной структуре и свойствах материалов FeBi_2Te_4 и MnBi_2Te_4 . Учитывая полученные данные, материал FeBi_2Te_4 является перспективным кандидатом для дальнейшего углубленного изучения, особенно в контексте топологических квантовых фаз и их возможных приложений.

Работа выполнена при поддержке Санкт-Петербургского государственного университета (грант № 95442847).

1. J. E. Hirsch. Spin Hall Effect. Phys. Rev. Lett. 83, 1999, 1834—1837.
2. Naoto Nagaosa и др., Rev. Mod. Phys. 82, 2010, 1539—1592.
3. М. М. Otrokov и др., Nature 576.7787, 2019, 416—422
4. D. Zhang и др., Phys. Rev. Lett. 122, 2019, 206401.
5. Wen-Ti Guo и др., arXiv, 2023, 2308.06716.