

**АНТИФЕРРОМАГНИТНЫЕ ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ИЗОЛЯТОРЫ  $MnBi_2Te_2Se_2$  И  $VBi_2Te_2Se_2$** Е.К. Петров

Научный руководитель: доцент, к.ф.-м.н. Т.В. Меньщикова  
Национальный исследовательский Томский государственный университет,  
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050  
E-mail: eg901petrov@gmail.com

**ANTIFERROMAGNETIC TOPOLOGICAL INSULATORS** **$MnBi_2Te_2Se_2$  AND  $VBi_2Te_2Se_2$** E.K. Petrov

Scientific Supervisor: Associate Prof., Ph.D T.V. Menshchikova  
Tomsk State University,  
Russia, Tomsk, Lenin avn., 36, 634050  
E-mail: eg901petrov@gmail.com

***Abstract.** Present study is devoted to ab initio investigation of  $MnBi_2Te_2Se_2$  and  $VBi_2Te_2Se_2$  compounds. It is shown that these compounds have the electronic structure features typical for a topological insulator. However, these compounds are antiferromagnetically ordered phases. Such antiferromagnetic topological insulators (AFM TI) were predicted in 2010 by Mong et al., and these compounds turn out to satisfy all requirements to be AFM TIs.*

**Введение.** В течение последнего десятилетия в физике конденсированного состояния наблюдается значительный рост интереса к топологически нетривиальным материалам. Особенно актуальными в этой области становятся исследования, направленные на поиск материалов, которые могут стать основой электроники нового поколения. Ведется активное изучение материалов, в которых возможно наблюдение ряда крайне многообещающих физических эффектов, например, квантового аномального эффекта Холла [1]. Одним из таких классов топологически нетривиальных материалов являются топологические изоляторы (ТИ), которые обладают особой электронной структурой, возникающей в результате наличия сильного спин-орбитального взаимодействия.

В 2010 году Монг и др. предложили концепцию антиферромагнитного (АФМ) ТИ [2]: особой антиферромагнитно упорядоченной топологически нетривиальной фазы. В силу АФМ упорядочения трансляционная симметрия и симметрия обращения времени нарушается, но сохраняется их комбинация (произведение). Наличие АФМ упорядочения не приводит к значительным отличиям от фазы ТИ в объеме кристалла, однако приводит к ряду интересных эффектов на поверхности. На сегодняшний день в опубликованных работах упоминается только один кандидат на роль АФМ ТИ –  $GdBiPt$  [3, 4].

**Методы и объект исследования.** В настоящей работе предложена группа соединений, обладающих описанными выше признаками АФМ ТИ –  $MnBi_2Te_2Se_2$  и  $VBi_2Te_2Se_2$ . Проведено первопринципное исследование их кристаллической структуры, магнитного упорядочения и анизотропии, а также электронной структуры объема и поверхности этих соединений. Исследование проведено в рамках теории функционала электронной плотности методом проекционных плоских волн,

реализованным в программном пакете VASP. Для учета поведения сильно-локализованных 3d-состояний атомов Mn и V был использован GGA+U-подход.

**Кристаллическая и магнитная структура.** Результаты расчетов показывают, что  $MnBi_2Te_2Se_2$  и  $VBi_2Te_2Se_2$  кристаллизуются в ромбоэдрической кристаллической решетке (рис. 1, а) и характеризуются АФМ упорядочением, при этом ось квантования спина лежит в плоскости (0001) (рис. 1, б).

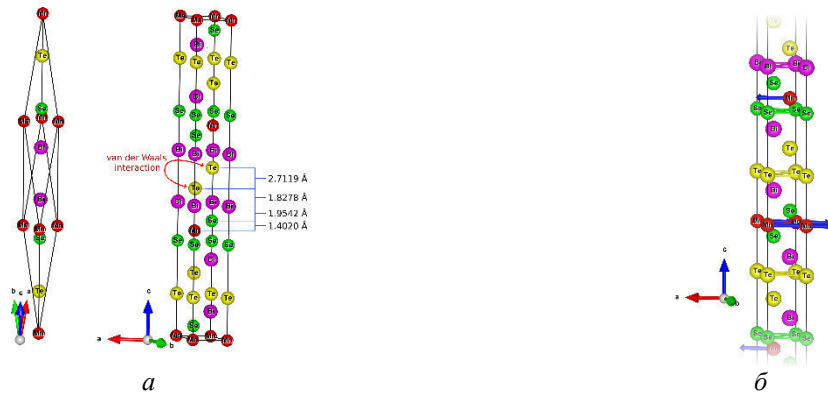


Рис. 1. (а) Кристаллическая решетка рассматриваемых соединений на примере  $MnBi_2Te_2Se_2$  в ромбоэдрическом (слева) и гексагональном (справа) базисах, а также значения межплоскостных расстояний; (б) магнитное упорядочение и направления магнитных моментов (синие стрелки) в рассматриваемых соединениях на примере  $MnBi_2Te_2Se_2$

**Зонная структура объема и поверхности.** На примере зонной структуры  $MnBi_2Te_2Se_2$  (рис. 2, а) видно, что в окрестности точки  $\Gamma$  орбитальный состав зон, образующих края энергетической щели, инвертирован, что является характерным признаком ТИ. Для того, чтобы убедиться, что энергетическая щель инвертирована именно за счет спин-орбитального взаимодействия, был проведен ряд расчетов при различных значениях константы спин-орбитального взаимодействия  $\Lambda = \lambda/\lambda_0$  от 0 (спин-орбитальное взаимодействие не учтено) до 1 (учтено полностью) (рис. 2, б). Отчетливо видно, что при  $\Lambda < 0.75$  энергетическая щель не инвертирована, при  $\Lambda = 0.75$  она закрывается, а при  $\Lambda > 0.75$  инвертирована. Группа соединений с ванадием демонстрирует качественно схожее поведение.

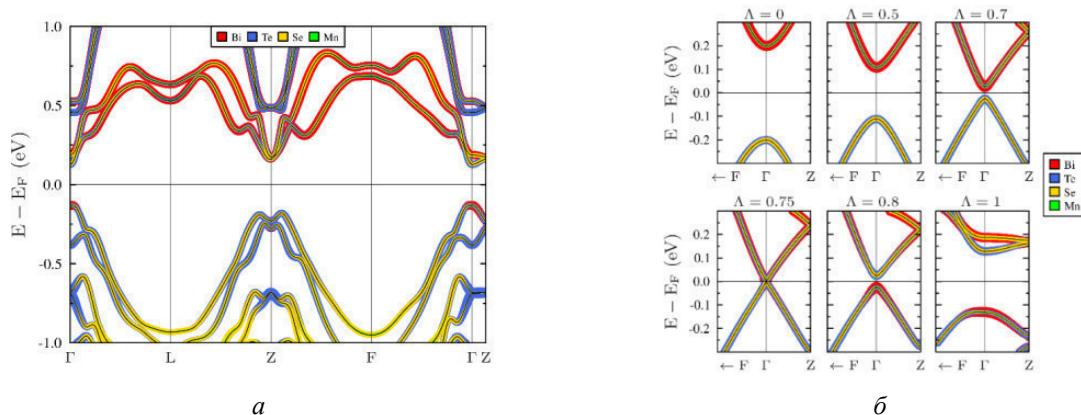


Рис. 2. (а) Зонная структура (черные линии) объема  $MnBi_2Te_2Se_2$  и орбитальный состав зон (цветные линии); (б) зонная структура и орбитальный состав  $MnBi_2Te_2Se_2$  в окрестности точки  $\Gamma$  при различных значениях  $\Lambda$

Прямым следствием наличия инвертированной энергетической щели в объеме материала являются бесщелевые поверхностные состояния. В зонной структуре поверхности  $\text{MnBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$  (рис. 3, а) отчетливо видно бесщелевое поверхностное состояние, обладающее характерной дисперсией, близкой к линейной. Наличие таких состояний типично для ТИ, однако поскольку рассматриваемое соединение обладает магнитным упорядочением, причем ось квантования спина лежит в плоскости (0001), точка Дирака сдвинута из точки  $\bar{\Gamma}$ . Схожая картина наблюдается и для  $\text{VBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$  (рис. 3, б). Видно, что зонная структура поверхности имеет те же особенности. Исключение составляет смещение конуса Дирака из точки  $\bar{\Gamma}$  – в случае  $\text{VBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$  оно меньше, что вызвано меньшим значением величины магнитного момента на ионах ванадия по сравнению с ионами марганца.

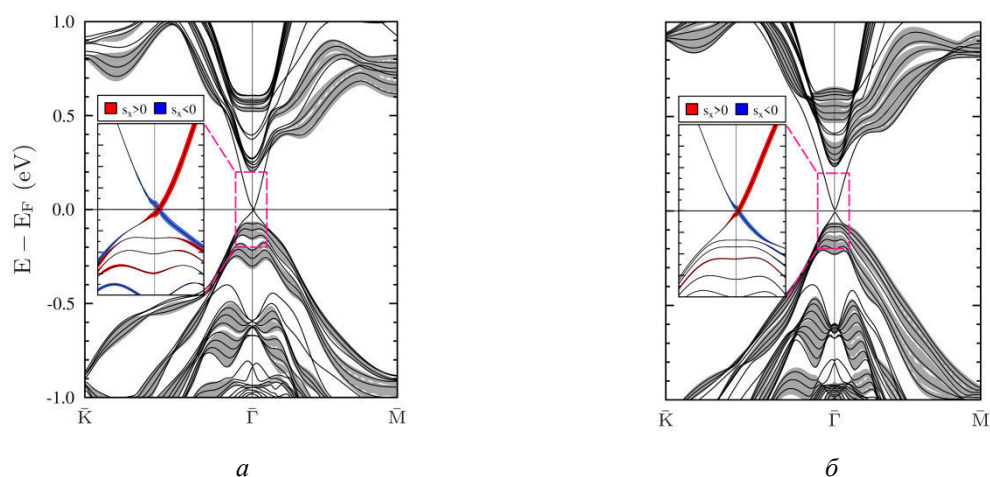


Рис. 3. Зонная структура поверхности  $\text{MnBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$  (а) и  $\text{VBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$  (б). Красными и синими линиями показана спиновая текстура бесщелевого поверхностного состояния

**Выводы.** Полученные результаты свидетельствуют о том, что рассмотренные соединения являются АФМ ТИ. Во-первых, в зонной структуре объема присутствует инвертированная энергетическая щель. Во-вторых, в зонной структуре поверхности имеется бесщелевое поверхностное состояние с дисперсией, близкой к линейной. При этом точка Дирака поверхностного бесщелевого состояния сдвинута из точки  $\bar{\Gamma}$  в силу наличия in-plane намагниченности в системе. И, наконец, это поверхностное состояние обладает типичной для ТИ геликоидальной (хиральной) спиновой текстурой.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00728.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hasan M. Z., Kane C. L. Colloquium: Topological insulators // *Reviews of Modern Physics*. – 2010. – Vol. 82. – №. 4. – P. 3045.
2. Mong R. S. K., Essin A. M., Moore J. E. Antiferromagnetic topological insulators // *Physical Review B*. – 2010. – Vol. 81. – №. 24. – P. 245209.
3. Müller R. A. et al. Magnetic structure of GdBiPt: A candidate antiferromagnetic topological insulator // *Physical Review B*. – 2014. – Vol. 90. – №. 4. – P. 041109.
4. Li Z. et al. Electronic structure of the antiferromagnetic topological insulator candidate GdBiPt // *Physical Review B*. – 2015. – V. 91. – №. 23. – P. 235128.