

## Особенности электронной структуры соединения FeTe

Г.Е. Гречнев, А.А. Лёгенькая, А.С. Панфилов, А.В. Логоша, А.В. Котляр, В.П. Гнездилов

*Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины  
пр. Ленина, 47, г. Харьков, 61103, Украина  
E-mail: grechnev@ilt.kharkov.ua*

**И.П. Макарова**

*Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, г. Москва, 119333, Россия*

**Д.А. Чареев**

*Институт экспериментальной минералогии РАН, г. Черноголовка, 142432, Россия*

**Е.С. Митрофанова**

*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, физический факультет, г. Москва, 119991, Россия*

Статья поступила в редакцию 10 июня 2015 г., опубликована онлайн 23 октября 2015 г.

Проведено теоретическое и экспериментальное исследование электронной структуры и характера химических связей соединения FeTe в антиферромагнитной (АФМ) и парамагнитной фазах. Установлен преимущественно металлический характер химической связи, а присутствие ковалентных связей Fe–Te и Te–Te способствует стабилизации структурных искажений тетрагональной фазы FeTe в области низких температур. Установлено, что биколлинеарная АФМ структура отвечает основному состоянию соединения FeTe и рассчитанная величина магнитного момента  $M_{\text{Fe}} = 2,4\mu_B$  хорошо согласуется с данными нейтронографических исследований. При этом поверхность Ферми (ПФ) низкотемпературной АФМ фазы радикально отличается от ПФ парамагнитного FeTe, и реконструкция ПФ при АФМ переходе может быть причиной изменения знака коэффициента Холла, который наблюдался в FeTe. Результаты расчетов свидетельствуют, что электронная структура и магнитные свойства FeTe хорошо описываются в рамках модели коллективизированных *d*-электронов и теории функционала плотности (DFT-GGA).

Проведено теоретичне та експериментальне дослідження електронної структури та характеру хімічних зв'язків сполуки FeTe в антиферомагнітній (АФМ) та парамагнітній фазах. Встановлено переважно металевий характер хімічного зв'язку, а наявність ковалентних зв'язків Fe–Te та Te–Te сприяє стабілізації структурних спотворень тетрагональної фази FeTe в області низьких температур. Встановлено, що біколлінеарна АФМ структура відповідає основному стану сполуки FeTe і розрахована величина магнітного моменту  $M_{\text{Fe}} = 2.4\mu_B$  добре узгоджується з даними нейтронографічних досліджень. При цьому поверхня Фермі (ПФ) низкотемпературної АФМ фази радикально відрізняється від ПФ парамагнітного FeTe, і реконструкція ПФ при АФМ переході може бути причиною зміни знаку коефіцієнта Холла, який спостерігався в FeTe. Результати розрахунків свідчать, що електронна структура та магнітні властивості FeTe добре описуються в рамках моделі колективізованих *d*-електронів та теорії функціонала густини (DFT-GGA).

PACS: 74.20.Pq Расчеты электронной структуры;  
74.70.Xa Пниктиды и халькогениды;  
75.10.Lp Зонные и делокализованные модели.

Ключевые слова: железосодержащие сверхпроводники, FeTe, электронная структура, поверхность Ферми, химическая связь.

**Введение**

Недавно открытые железосодержащие сверхпроводники (СП)  $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$  привлекают особое внимание исследователей вследствие простоты их кристаллической структуры. Для этих изовалентных халькогенидов железа характерно сохранение анизотропной тетрагональной структуры типа PbO в широком диапазоне концентраций, что благоприятствует детальным исследованиям эффектов химического замещения  $\text{Se} \leftrightarrow \text{Te}$  [1–6], а также высокого давления [7], с целью выяснения механизма сверхпроводимости.

Граничные соединения указанных твердых растворов — FeSe и FeTe — в парамагнитной фазе имеют похожие электронные структуры с характерным «нестингом» поверхности Ферми (ПФ) — наличием вкладывающихся электронных и дырочных гофрированных цилиндров ПФ [8]. Такой нестинг может способствовать реализации как зонного антиферромагнетизма (АФМ), так и предложенного нетрадиционного механизма сверхпроводимости — посредством АФМ спиновых флуктуаций с вектором нестинга  $\mathbf{Q}$ , соответствующим волне спиновой плотности [8,9]. Для пниктидов железа имеет место аналогичный нестинг ПФ, который приводит в стехиометрических соединениях (типа LaFeAsO) к характерному АФМ упорядочению моментов Fe в базисной плоскости в виде чередующихся коллинеарных полос («страйпов», «single-stripe») с  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ . Предполагалось, что FeTe тоже может быть сверхпроводником, аналогично FeSe, вследствие подобного нестинга [8,9]. Однако в образцах  $\text{Fe}_{1+y}\text{Te}$  при температурах ниже 70 К было установлено АФМ состояние с уникальной биколлинеарной страйп-структурой («double stripe», см. рис. 1) и вектором распространения спиновой плотности  $\mathbf{Q} = (\pi, 0)$  [10–12].

Обнаруженная особенность в температурной зависимости магнитной восприимчивости  $\chi(T)$  при  $T \simeq 70$  К [13,14] не характерна для перехода в АФМ фазу, а связана с одновременным структурным фазовым переходом первого рода из тетрагональной кри-

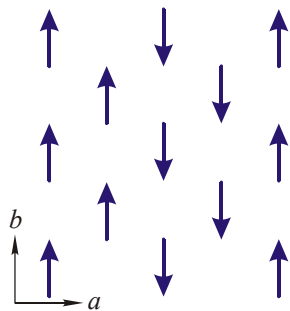


Рис. 1. Схема упорядочения магнитных моментов ионов железа в базисной плоскости соединения FeTe в биколлинеарной АФМ фазе.

сталлической структуры в низкотемпературную моноклинную фазу, который сопутствует возникновению антиферромагнетизма [3,10,11]. Для почти стехиометрических составов  $\text{Fe}_{1+y}\text{Te}$  при низких температурах реализуется моноклинная кристаллическая структура и АФМ упорядочение в базисной плоскости  $ab$  [3,11]. Природа ярко выраженной корреляции между структурным и магнитным переходами в  $\text{Fe}_{1+y}\text{Te}$  не ясна. Предполагалось [10], что основной вклад в изменение энтропии при переходе вносит АФМ упорядочение и сам переход обусловлен магнитной подсистемой. Однако в работах [1,3] был сделан вывод, что определяющим является структурный фазовый переход.

Необходимо отметить, что сверхпроводимость была обнаружена при 13 К в тонких пленках FeTe, напыленных на специальные подложки, что обеспечило сильную деформацию исходной кристаллической структуры [15]. В предположении, что подавление структурного и магнитного переходов может стимулировать возникновение сверхпроводимости, были предприняты попытки реализовать СП состояние в объемных образцах FeTe при высоких давлениях [9,16]. Однако при измерениях удельного электросопротивления FeTe при давлениях до 190 кбар никаких следов СП не обнаружено. Это согласуется с наблюдением отрицательного эффекта давления на температуру перехода в СП состояние в обогащенных теллуром соединениях  $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$  при  $x \sim 0,8-0,9$  [7]. С другой стороны, с ростом давления наблюдалось необычное увеличение намагниченности FeTe [16]. Также аномально большой положительный эффект давления на магнитную восприимчивость обнаружен для парамагнитной и АФМ фаз FeTe [14]. Наконец, недавно было установлено [17,18], что в FeTe происходит переход от АФМ к ферромагнитной фазе при давлениях выше 2 ГПа.

Таким образом, имеются основания считать, что магнетизм соединения FeTe не может быть объяснен возникновением волн спиновой плотности вследствие «нестинга» ПФ типа  $(\pi, \pi)$ , подобного «нестингу» электронных и дырочных листов ПФ в новых железосодержащих сверхпроводниках [8]. Сделаны предположения [12,19], что наблюдаемое биколлинеарное АФМ упорядочение в FeTe может быть обусловлено взаимодействиями локализованных спиновых моментов, включая также и вклад делокализованных электронов, без привлечения модели «нестинга». В работе [20] показано, что допирование FeTe избыточным железом может привести к другому типу «нестинга» в  $\text{Fe}_{1+y}\text{Te}$  —  $(\pi, 0)$ , — который мог бы объяснить биколлинеарное АФМ упорядочение (рис. 1). Однако такой тип «нестинга» не был подтвержден в исследованиях FeTe методом спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) [21].

Совокупность приведенных выше экспериментальных и теоретических результатов указывает на то, что

электронные и магнитные свойства соединений  $\text{Fe}_{1+y}\text{Te}$  определяются тонкими деталями кристаллической структуры и количеством избыточного железа  $y$ . Всесторонние исследования электронной структуры необходимы, чтобы выяснить механизмы магнитного упорядочения в  $\text{FeTe}$  и объяснить происхождение его магнитных и структурных фазовых переходов. Такие исследования позволят пролить свет на условия формирования СП состояния в соединениях  $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$  и, в частности, на причины отсутствия сверхпроводимости в изоструктурном и изовалентном  $\text{FeTe}$ . В настоящей работе представлены результаты экспериментальных и теоретических исследований электронной структуры соединения  $\text{FeTe}$  в парамагнитной и антиферромагнитной фазах.

## 2. Детали и результаты эксперимента

Монокристаллы соединений  $\text{Fe}_{1+y}\text{Te}$  ( $y \simeq 0,1$ ) выращены с использованием методики, описанной в работах [6,22]. Типичные размеры выращенных пластинчатых монокристаллов  $1 \times 1 \times 0,2$  мм (рис. 2). Химический состав образцов изучен с использованием цифрового сканирующего электронного микроскопа TESCAN Vega II XMU, оснащенного энергодисперсионной системой микроанализа INCA ENERGY 450.

Рентгенодифракционные исследования проведены на дифрактометре Xcalibur S фирмы Oxford Diffraction с двумерным CCD-детектором при комнатной температуре (графитовый монохроматор,  $\text{Mo } K_\alpha$ -излучение, 293 К). Обработка массива экспериментальных данных и учет поглощения в кристалле проведены с помощью программы CrysAlis [23], а уточнение структурной модели — по кристаллографическому комплексу программ JANA 2006 [24]. Анализ закономерных погасаний и эквивалентных по симметрии отражений позволил однозначно выбрать пространственную группу  $P4/nmm$ , что соответствует приведенным в литературе данным для этого соединения. В качестве исходных данных для уточнения атомной структуры использованы пози-

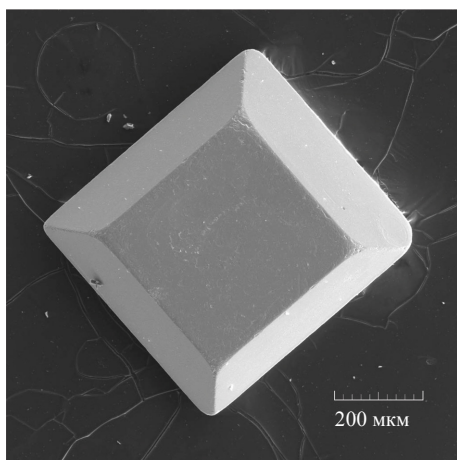


Рис. 2. Микрофотография типичного образца  $\text{FeTe}$ .

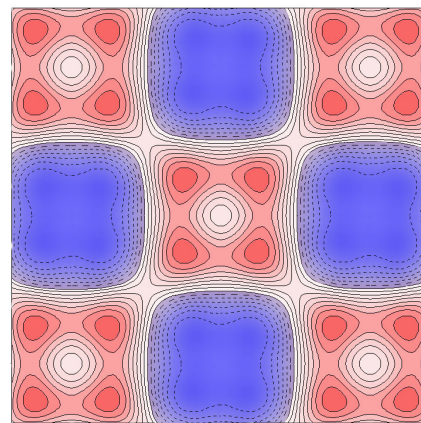


Рис. 3. (Онлайн в цвете) Сечение распределения деформационной электронной плотности в плоскости атомов железа (001) для парамагнитной фазы  $\text{FeTe}$ .

ционные параметры атомов из [25]. Используя уточненные структурные данные, по 66 структурным амплитудам с  $\sin \theta / \lambda < 0,6$  было построено распределение деформационной электронной плотности

$$\delta\rho(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}) - \sum_i \rho(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i), \quad (1)$$

где  $\rho(\mathbf{r})$  — распределение электронной плотности в кристалле,  $\sum_i \rho(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$  — сумма распределений электронных плотностей сферически симметричных невзаимодействующих атомов данной структуры (рис. 3, изолинии проведены через  $0,02$  электрон/ $\text{\AA}^3$ ).

## Электронная структура $\text{FeTe}$ . Результаты расчетов и их анализ

В настоящей работе расчеты электронной структуры  $\text{FeTe}$  проводились самосогласованным образом в рамках теории функционала плотности (DFT) с использованием релятивистского метода линейаризованных МТ (muffin-tin) орбиталей с полным потенциалом (FP-LMTO) [26–28], а также метода присоединенных плоских волн с полным потенциалом (FP-LAPW), программный комплекс Elk [29]. Обменно-корреляционный потенциал электронов проводимости учитывался в приближении обобщенного градиента (GGA) теории функционала плотности [30]. Методы DFT с полным потенциалом применимы для расчетов электронных спектров систем с существенно неоднородным распределением электронной плотности. К таким системам относится и соединение  $\text{FeTe}$ , исследованное в данной работе. В процессе самосогласованного расчета кристаллического потенциала спин-орбитальное взаимодействие учитывалось на каждой итерации.

При температурах выше 70 К соединения  $\text{Fe}_{1+y}\text{Te}$  обладают тетрагональной кристаллической структурой типа  $\text{PbO}$  (пространственная группа  $P4/nmm$ ), в которой расстояние атомов  $\text{Te}$  от плоскости атомов железа

определяется внутренним структурным параметром  $Z$ . С понижением температуры, при  $T \simeq 70$  К, в соединениях  $\text{Fe}_{1+y}\text{Te}$  ( $y \simeq 0,1$ ) происходит фазовый переход первого рода от тетрагональной к моноклинной структуре, который сопровождается биколлинеарным АФМ упорядочением [3,10,11]. Соответствующие параметры кристаллической структуры парамагнитной и АФМ фаз  $\text{Fe}_{1+y}\text{Te}$  были установлены в ряде работ методами рентгеновской и нейтронной дифракции [2–4,10,25], и эти экспериментальные данные использованы в настоящей работе. Для биколлинеарной АФМ фазы выбиралась элементарная магнитная ячейка  $[2a \times b \times c]$ , соответствующая рис. 1. Структурные параметры  $a$ ,  $b$  и  $c$  брались согласно [3,10], тогда как угол между осями  $a$  и  $c$  принимался равным  $90^\circ$  (вместо  $89,2^\circ$  для структуры с малым моноклинным искажением).

Рассчитанные основные характеристики электронной структуры FeTe в парамагнитной фазе находятся в качественном согласии с результатами предыдущих расчетов [8,19,20,31,32]. Согласно результатам расчета плотности электронных состояний  $N(E)$  на рис. 4, в парамагнитной фазе соединение FeTe имеет наибольшую плотность состояний на уровне Ферми  $N(E_F)$  в ряду систем  $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$ , и критерий Стонера практически удовлетворяется для экспериментальных значений параметров решетки:  $IN(E_F) \simeq 1$ , где  $I$  — параметр обменного взаимодействия. Это указывает на неустойчивость парамагнитного состояния FeTe и возможность перехода в ферромагнитную фазу, что согласуется с

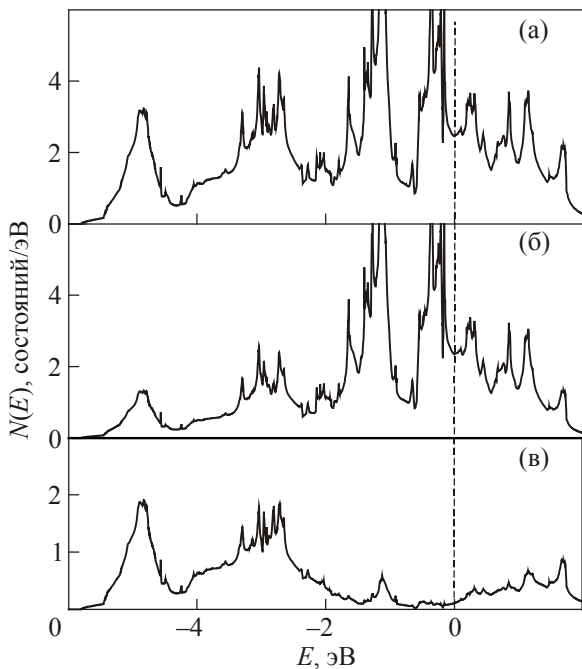


Рис. 4. Плотности электронных состояний  $N(E)$  соединения FeTe в парамагнитной фазе: (а) полная плотность состояний FeTe на формульную единицу; (б) плотность состояний на атоме железа; (в) плотность состояний на атоме теллура. Уровень Ферми ( $E = 0$ ) отмечен вертикальной линией.

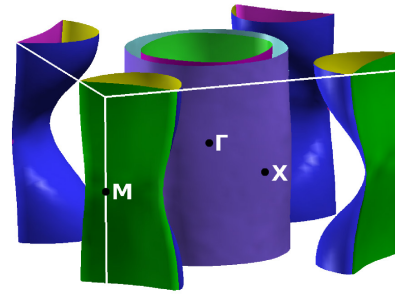


Рис. 5. (Онлайн в цвете) Поверхность Ферми соединения FeTe в парамагнитной фазе. Точки симметрии зоны Бриллюэна указаны согласно [33].

недавним наблюдением ферромагнетизма в  $\text{Fe}_{1,03}\text{Te}$  при давлениях выше 2 ГПа [17,18]. Поверхность Ферми для парамагнитной фазы, представленная на рис. 5, состоит из двух гофрированных электронных цилиндров, центрированных в точке М зоны Бриллюэна, а также трех concentрических дырочных листов, окружающих точку симметрии  $\Gamma$ , и подобна установленной ранее для соединения FeSe (см. [8,34]). По сравнению с ПФ FeSe, следует отметить заметно большие радиусы квазицилиндрических листов ПФ, центрированных в точках симметрии  $\Gamma$  и М.

Рассчитанные парциальные плотности электронных состояний на рис. 4 указывают, что в окрестности уровня Ферми  $E_F$  определяющим является вклад  $d$ -состояний железа. На рис. 6 представлено вычисленное в данной работе распределение зарядовой плотности в базисной плоскости (001) элементарной ячейки FeTe. На рисунке видна характерная для  $d$ -орбиталей четырехлепестковая структура электронной плотности, которая качественно согласуется с экспериментальными данными о распределении плотности заряда на рис. 3. Отметим, что оси координат на рис. 3 и 6 повернуты относительно друг друга на  $45^\circ$ . Также следует учесть, что более сферический характер распределения рас-

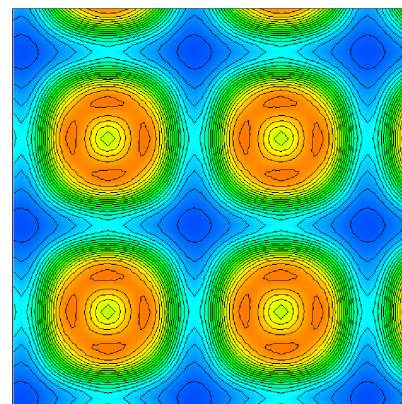


Рис. 6. (Онлайн в цвете) Рассчитанные контуры зарядовой плотности для парамагнитной фазы соединения FeTe в плоскости атомов железа (001).

четной электронной плотности на рис. 6 обусловлен усреднением потенциала в области МТ-сфер.

Выполненные в приближении GGA расчеты уравнений состояния  $E_{\text{tot}}(V)$  для магнитоупорядоченных фаз FeTe (ферромагнитной, коллинейрной АФМ, биколлинейрной АФМ) показали, что для биколлинейрной АФМ фазы достигается минимальная полная энергия  $E_{\text{tot}}$ , и эта фаза является основным состоянием соединения FeTe. Рассчитанные для основного состояния электронная зонная структура и поляризованная по направлению спина плотность электронных состояний представлены на рис. 7 и 8 соответственно.

При антиферромагнитном упорядочении в FeTe происходит расщепление по спину плотности состояний  $N(E)$  (рис. 8(б) и (в)) и формирование магнитных моментов на атомах железа. Полученное в наших расчетах значение  $M_{\text{Fe}} \cong 2,37\mu_B$  согласуется с данными нейтронографических исследований ( $M_{\text{Fe}}^{\text{exp}} = 2,26-2,54\mu_B$  [3,10]). Такое хорошее согласие с экспериментом свидетельствует об адекватности используемого нами зонного подхода в приближении DFT-GGA для изучения магнитных характеристик FeTe. Рассчитанные контуры спиновой плотности в плоскости (001) для биколлинейрной антиферромагнитной фазы соединения FeTe представлены на рис. 9.

На рис. 10 приведены вычисленные в настоящей работе контуры распределения зарядовой плотности в плоскости (100) элементарной ячейки соединения FeTe. На рисунке видна заметная анизотропия распределения зарядовой плотности между атомом железа и ближайшими к нему атомами теллура. Необходимо отметить, что вклад  $p$ -состояний Te в  $N(E)$  валентной зоны FeTe заметно обеднен (рис. 8(г)) вследствие перетекания заряда от Te к соседним атомам Fe и в между-

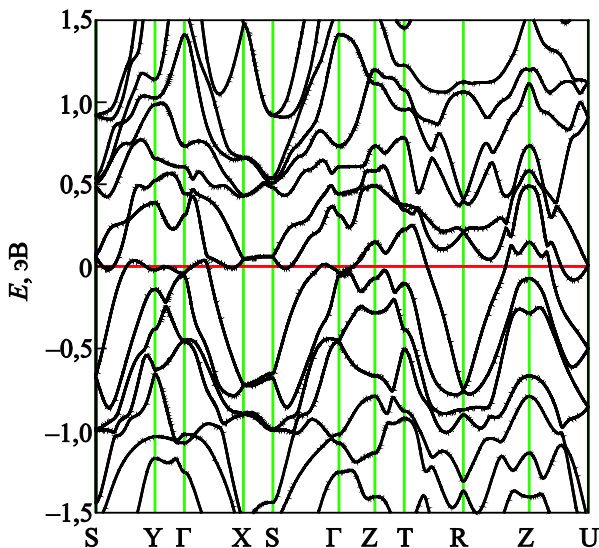


Рис. 7. (Онлайн в цвете) Электронная зонная структура FeTe в биколлинейрной АФМ фазе. Точки симметрии зоны Бриллюэна указаны согласно [33]. Уровень Ферми отмечен горизонтальной линией  $E = 0$ .

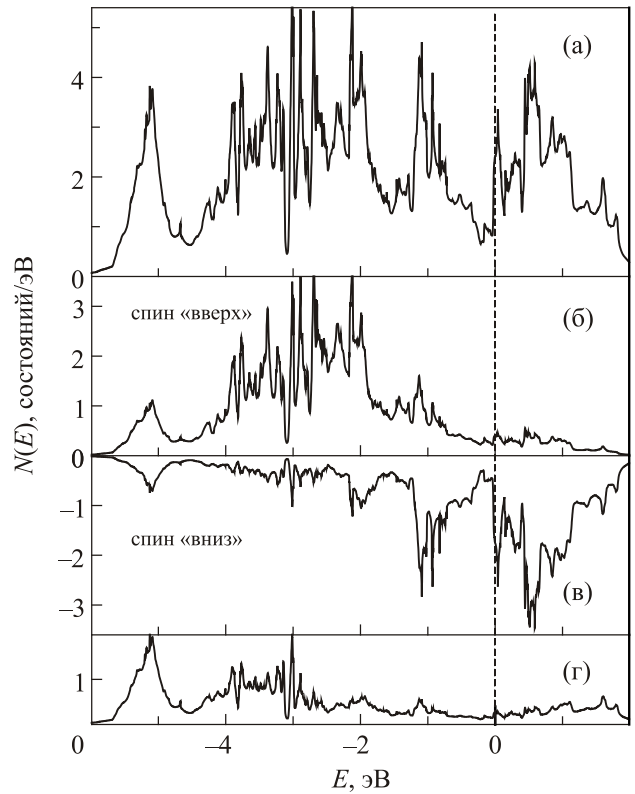


Рис. 8. Плотности электронных состояний  $N(E)$  соединения FeTe в биколлинейрной антиферромагнитной фазе: (а) полная плотность состояний FeTe на формульную единицу; (б) спин-поляризованная плотность состояний на атоме Fe (спин «вверх»); (в) спин-поляризованная плотность состояний на атоме Fe (спин «вниз»); (г) плотность состояний на атоме теллура. Уровень Ферми ( $E = 0$ ) отмечен вертикальной линией.

узельную область. Можно предположить, что установление направленных связей между соседними атомами Fe и Te (рис. 10) обусловлено гибридизацией  $d$ -орбиталей железа с  $p$ -орбиталями теллура.

Для более детального исследования природы химических связей в соединении FeTe в настоящей работе проведены расчеты заселенностей перекрытия кристал-

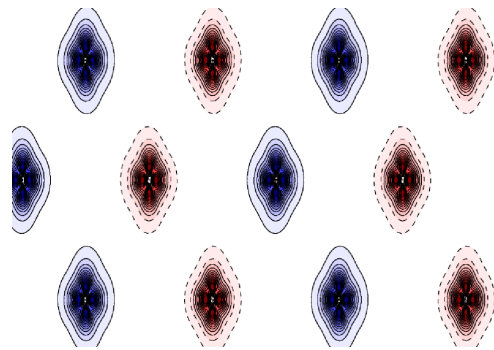


Рис. 9. (Онлайн в цвете) Рассчитанные контуры спиновой плотности в плоскости (001) для биколлинейрной антиферромагнитной фазы соединения FeTe.

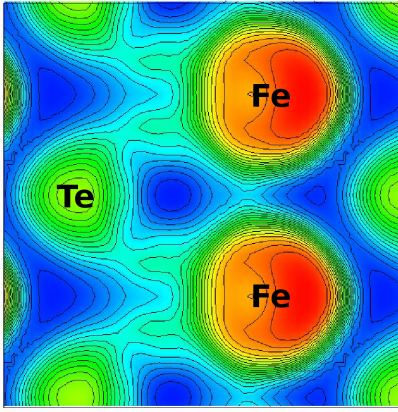


Рис. 10. (Онлайн в цвете) Рассчитанные контуры зарядовой плотности в плоскости (100) для соединения FeTe в антиферромагнитной фазе.

лических орбиталей (BCOOP [35]) в рамках метода FP-LMTO [27]. Рассчитанные зависимости BCOOP( $E$ ) (см. рис. 11) — обобщение для твердых тел известных в квантовой химии характеристик молекул COOP (crystal orbital overlap population). Величины BCOOP зависят от энергии электронных состояний валентной зоны и, согласно [35], оказываются положительными для связывающих орбиталей, отрицательными — для антисвязывающих, а также в случае металлического типа связи.

Согласно результатам расчетов BCOOP( $E$ ), наиболее выраженные связывающие и антисвязывающие состояния в FeTe образуются при гибридизации  $p$ -состояний ближайших атомов теллура (рис. 11(в)). Перекрывание орбиталей Fe–Te дает связывающие состояния ближе к

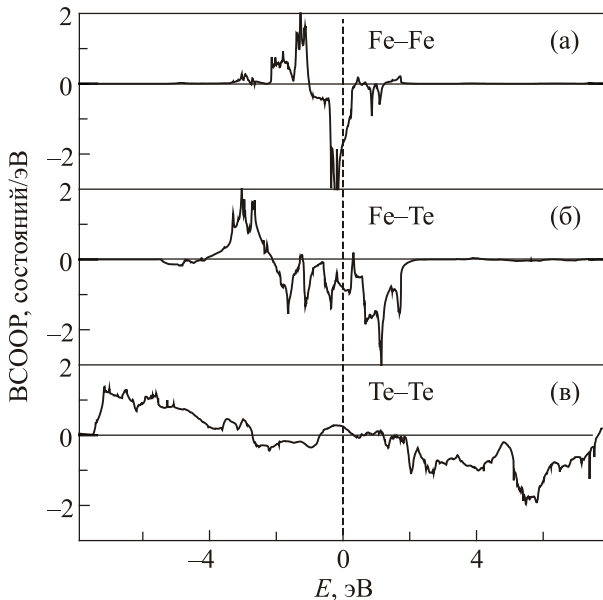


Рис. 11. Заселенности перекрытия кристаллических орбиталей BCOOP( $E$ ) соединения FeTe в антиферромагнитной фазе для следующих пар ближайших атомов в элементарной ячейке: (а) Fe–Fe; (б) Fe–Te; (в) Te–Te. Уровень Ферми ( $E = 0$ ) отмечен вертикальной линией.

дну валентной зоны (положительные BCOOP( $E$ ) в интервале  $-4 \dots -2$  эВ на рис. 11(б)). Это согласуется с характерным совпадением по энергии доминирующих областей парциальных плотностей  $d$ -состояний железа (рис. 8(б)) и  $p$ -состояний теллура (рис. 8(г)) в валентной зоне FeTe. Связывающие состояния также реализуются при перекрытии орбиталей Fe–Fe в интервале  $-3 \dots -1$  эВ (рис. 11(а)), что согласуется с результатами расчетов для изовалентного железа рутения в [35]. Вблизи энергии Ферми, в интервале  $-1 \dots 1$  эВ, для связей Fe–Te и Fe–Fe получены отрицательные значения BCOOP( $E$ ) (рис. 11(а) и (б)), что соответствует металлическому характеру химической связи. Распределение электронной плотности в базисной плоскости FeTe (рис. 3 и 6) также характерно для металлической связи, тогда как в области между плоскостями Fe и Te отчетливо прослеживаются ковалентные связи (рис. 10).

Для биколлинеарной АФМ фазы соединения FeTe установлен довольно сложный вид ПФ, приведенной на рис. 12. При этом поверхность Ферми низкотемпературной фазы радикально отличается от ПФ парамагнитного FeTe на рис. 5. Эта реконструкция ПФ при АФМ переходе может быть причиной изменения знака коэффициента Холла, который наблюдался в FeTe [13,36]. Вследствие многозонной электронной структуры FeTe при АФМ переходе, по-видимому, происходит перераспределение вкладов в коэффициент Холла от электронных и дырочных листов поверхности Ферми. Необходимо, однако, отметить, что количественный анализ поведения коэффициента Холла в FeTe потребовал бы детального изучения не только ПФ, но и изменения скорости электронов проводимости и времени релаксации.

Расчетное значение плотности электронных состояний для АФМ фазы на уровне Ферми,  $N(E_F) \approx 3$  состояний/эВ, может быть сопоставлено с экспериментальными данными о коэффициенте электронной теплоемкости в FeTe,  $\gamma_{\text{exp}} \approx 34$  мДж/(моль·К<sup>2</sup>) [13,37]:

$$\gamma_{\text{exp}} = (1 + \lambda)\gamma_{\text{theor}} \quad (2)$$

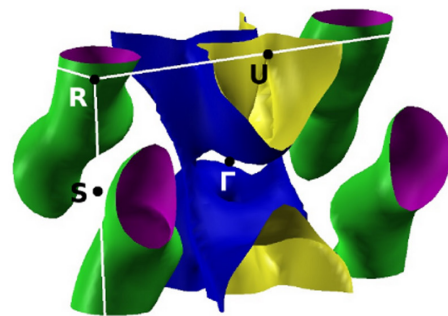


Рис. 12. (Онлайн в цвете) Поверхность Ферми FeTe в биколлинеарной АФМ фазе. Точки симметрии зоны Бриллюэна указаны согласно [33].

Соответствующий параметр перенормировки  $\lambda$  включает электрон-фононный ( $\lambda_{el-ph}$ ) и спин-флуктуационный ( $\lambda_{sf}$ ) вклады и, согласно (2), составляет  $\lambda \simeq 3,8$ . Необходимо отметить, что спин-флуктуационный вклад  $\lambda_{sf}$  может быть довольно большим для металлических систем, близких к магнитной неустойчивости [26]. Резкий спад температуры перехода в СП состояние в соединениях  $FeSe_{1-x}Te_x$  при приближении к FeTe указывает на то, что сильные спиновые флуктуации по крайней мере не способствуют возникновению сверхпроводимости в системе FeTe [7].

### Заключение

Результаты настоящей работы указывают на преимущественно металлический характер химической связи в соединении FeTe, доминирующий в базисной плоскости атомов железа (001), с частично ковалентными составляющими связей Fe–Te, Te–Te и Fe–Fe. Можно предполагать, что присутствие ковалентных связей способствует стабилизации структурных моноклинных искажений тетрагональной фазы FeTe в области низких температур. При этом гибридизация  $d$ -состояний железа с  $p$ -состояниями теллура приводит к выраженной пространственной анизотропии распределения плотности заряда в области между плоскостями атомов Fe и Te, а также к переносу заряда Te→Fe.

В ряде работ магнетизм соединения FeTe интерпретировался в рамках модели локализованных моментов на атомах железа [12,17,38–40]. Результаты же настоящих расчетов свидетельствуют, что магнитные свойства FeTe хорошо описываются в рамках модели делокализованных электронов и DFT. В частности, установлено, что биколлинейрная АФМ фаза имеет более низкую полную энергию, чем парамагнитная, ферромагнитная и коллинейрная АФМ фазы, и является основным состоянием соединения FeTe. Рассчитанное значение магнитного момента для биколлинейрной АФМ фазы ( $M_{Fe} \simeq 2,4\mu_B$ ) хорошо согласуется с данными нейтронографических исследований. Установленное выполнение критерия Стонера  $IN(E_F) \simeq 1$  для парамагнитного состояния FeTe фактически объясняет обнаруженный переход в ферромагнитную фазу системы  $Fe_{1,03}Te$  при давлениях выше 2 ГПа [18].

В заключение необходимо отметить серьезные проблемы при описании магнитных свойств FeTe в рамках модели Гейзенберга [12,38,40], тогда как при учете делокализованного характера  $d$ -электронов железа удалось объяснить обнаруженные вариации магнитной анизотропии и вектора АФМ в соединениях  $Fe_{1+y}Te$  [22].

Работа выполнена при поддержке гранта НАНУ-РФФИ 78-02-14, а также с использованием вычислительных ресурсов грид-кластера ФТИНТ им. Б.И. Веркина НАН Украины, Харьков.

1. T.M. McQueen, A.J. Williams, P.W. Stephens, J. Tao, Y. Zhu, V. Ksenofontov, F. Casper, C. Felser, and R.J. Cava, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 057002 (2009).
2. Y. Mizuguchi and Y. Takano, *J. Phys. Soc. Jpn.* **79**, 102001 (2010).
3. A. Martinelli, A. Palenzona, M. Tropeano, C. Ferdeghini, M. Putti, M.R. Cimberle, T.D. Nguyen, M. Affronte, and C. Ritter, *Phys. Rev. B* **81**, 094115 (2010).
4. R. Viennois, E. Giannini, D. van der Marel, and R. Černý, *J. Solid State Chem.* **183**, 769 (2010).
5. A.V. Fedorchenko, G.E. Grechnev, V.A. Desnenko, A.S. Panfilov, S.L. Gnatchenko, V.V. Tsurkan, J. Deisenhofer, H.-A. Krug von Nidda, A. Loidl, D.A. Chareev, O.S. Volkova, and A.N. Vasiliev, *Fiz. Nizk. Temp.* **37**, 100 (2011) [*Low Temp. Phys.* **37**, 83 (2011)].
6. Y.A. Ovchenkov, D.A. Chareev, E.S. Kozlyakova, O.S. Volkova, and A.N. Vasiliev, *Physica C* **489**, 32 (2013).
7. А.С. Панфилов, В.А. Пашенко, Г.Е. Гречнев, В.А. Десненко, А.В. Федорченко, А.Н. Блудов, С.Л. Гнатченко, Д.А. Чареев, Е.С. Митрофанова, А.Н. Васильев, *ФНТ* **40**, 793 (2014) [*Low Temp. Phys.* **40**, 615 (2014)].
8. A. Subedi, L. Zhang, D.J. Singh, and M.H. Du, *Phys. Rev. B* **78**, 134514 (2008).
9. Y. Mizuguchi, F. Tomioka, S. Tsuda, T. Yamaguchi, and Y. Takano, *Physica C* **469**, 1027 (2009).
10. S. Li, C. de la Cruz, Q. Huang, Y. Chen, J.W. Lynn, J. Hu, Y.-L. Huang, F.-C. Hsu, K.-W. Yeh, M.-K. Wu, and P. Dai, *Phys. Rev. B* **79**, 054503 (2009).
11. W. Bao, Y. Qiu, Q. Huang, M.A. Green, P. Zajdel, M.R. Fitzsimmons, M. Zhernenkov, S. Chang, M. Fang, B. Qian, E.K. Vehstedt, J. Yang, H.M. Pham, L. Spinu, and Z.Q. Mao, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 247001 (2009).
12. F. Ma, W. Ji, J. Hu, Z.-Y. Lu, and T. Xiang, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 177003 (2009).
13. G.F. Chen, Z.G. Chen, J. Dong, W.Z. Hu, G. Li, X.D. Zhang, P. Zheng, J.L. Luo, and N.L. Wang, *Phys. Rev. B* **79**, 140509(R) (2009).
14. A.V. Fedorchenko, G.E. Grechnev, V.A. Desnenko, A.S. Panfilov, S.L. Gnatchenko, V. Tsurkan, J. Deisenhofer, A. Loidl, O.S. Volkova, and A.N. Vasiliev, *J. Phys.: Condens. Matter* **23**, 325701 (2011).
15. Y. Han, W.Y. Li, L.X. Cao, X.Y. Wang, B. Xu, B.R. Zhao, Y.Q. Guo, and J.L. Yang, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 017003 (2010).
16. H. Okada, H. Takahashi, Y. Mizuguchi, Y. Takano, and H. Takahashi, *J. Phys. Soc. Jpn.* **78**, 083709 (2009).
17. M. Bendele, A. Maisuradze, B. Roessli, S.N. Gvasaliya, E. Pomjakushina, S. Weyeneth, K. Conder, H. Keller, and R. Khasanov, *Phys. Rev. B* **87**, 060409(R) (2013).
18. M. Bendele, E. Pomjakushina, K. Conder, R. Khasanov, and H. Keller, *J. Supercond. Nov. Magn.* **27**, 965 (2014).
19. M.D. Johannes and I.I. Mazin, *Phys. Rev. B* **79**, 220510(R) (2009).
20. M.-J. Han and S.Y. Savrasov, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 067001 (2009).

21. K. Nakayama, T. Sato, P. Richard, T. Kawahara, Y. Sekiba, T. Qian, G.F. Chen, J.L. Luo, N.L. Wang, H. Ding, and T. Takahashi, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 197001 (2010).
22. G.E. Grechnev, A.S. Panfilov, A.V. Fedorchenko, A.A. Lyogenkaya, I.P. Zhuravleva, D.A. Chareev, A.N. Nekrasov, E.S. Mitrofanova, O.S. Volkova, A.N. Vasiliev, and O. Eriksson, *J. Phys.: Condens. Matter* **26**, 436003 (2014).
23. CrysAlisPro, *Oxford Diffraction*, Yarnton, Oxfordshire, England (2011).
24. V. Petriček, M. Dusek, and L. Palatinus, *JANA 2006*, Institute of Physics, Prague, Czech Republic (2006).
25. И.О. Щичко, И.П. Макарова, М.Ю. Пресняков, С.М. Казаков, Е.В. Антипов, Д.А. Чареев, Е.С. Митрофанова, А.А. Михуткин, А.Л. Васильев, *Кристаллография* **60**, 221 (2015) [*Crystallography Reports* **60**, 227 (2015)].
26. G.E. Grechnev, *Fiz. Nizk. Temp.* **35**, 812 (2009) [*Low Temp. Phys.* **35**, 638 (2009)].
27. J.M. Wills, M. Alouani, P. Andersson, A. Delin, O. Eriksson, and A. Grechnev, *Full-Potential Electronic Structure Method. Energy and Force Calculations with Density Functional and Dynamical Mean Field Theory*, *Springer Series in Solid-State Sciences*, Springer Verlag, Berlin, Vol. 167 (2010).
28. <http://fplmto-rspt.org/>
29. <http://elk.sourceforge.net/>
30. J.P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
31. M.-C. Ding, H.-Q. Lin, and Y.-Z. Zhang, *Phys. Rev. B* **87**, 125129 (2013).
32. A. Ciechan, M.J. Winiarski, and M. Samsel-Czekala, *J. Phys.: Condens. Matter* **26**, 025702 (2014).
33. C. Bradley and A. Cracknell, *The Mathematical Theory of Symmetry in Solids: Representation Theory for Point Groups and Space Groups*, Oxford University Press, Ely House, London (1972).
34. А.В. Логоша, Г.Е. Гречнев, А.А. Лёгенькая, А.С. Панфилов, *ФНТ* **40**, 405 (2014) [*Low Temp. Phys.* **40**, 311 (2014)].
35. A. Grechnev, R. Ahuja, and O. Eriksson, *J. Phys.: Condens. Matter* **15**, 7751 (2003).
36. Y. Liu, R.K. Kremer, and C.T. Lin, *Supercond. Sci. Technol.* **24**, 035012 (2011).
37. S.L. Bud'ko, P.C. Canfield, A.S. Sefat, B.C. Sales, M.A. McGuire, and D. Mandrus, *Phys. Rev. B* **80**, 134523 (2009).
38. C.-Y. Moon and H.J. Choi, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 057003 (2010).
39. V. Gnezdilov, Yu. Pashkevich, P. Lemmens, A. Gusev, K. Lamonova, T. Shevtsova, I. Vitebskiy, O. Afanasiev, S. Gnatchenko, V. Tsurkan, J. Deisenhofer, and A. Loidl, *Phys. Rev. B* **83**, 245127 (2011).
40. J.K. Glasbrenner, J.P. Velev, and I.I. Mazin, *Phys. Rev. B* **89**, 064509 (2014).

### Features of the electronic structure of FeTe compound

G.E. Grechnev, A.A. Lyogenkaya, A.S. Panfilov, A.V. Logosha, O.V. Kotlyar, V.P. Gnezdilov, I.P. Makarova, D.A. Chareev, and E.S. Mitrofanova

The electronic structure and chemical bonds character of FeTe compound in antiferromagnetic (AFM) and paramagnetic phases were studied both experimentally and theoretically. Predominantly, metal character of chemical bonds in FeTe compound is established, and the presence of covalent bonds between Fe–Te and Te–Te atoms provides stabilization of structural distortions of the tetragonal phase at low temperatures. It is established that double stripe AFM phase corresponds to the ground state of FeTe compound, and the calculated value of magnetic moment  $M_{\text{Fe}} = 2,4\mu_B$  is in agreement with the results of neutron diffraction measurements. At the same time, the Fermi surface (FS) of low-temperature AFM phase substantially differs from FS of paramagnetic FeTe. Fermi surface reconstruction at AFM transition can produce a sign change of the Hall coefficient which was observed in FeTe. Results of the calculations demonstrate that electronic structure and magnetic properties of FeTe are well described within the itinerant *d*-electrons approach and the density functional theory (DFT-GGA).

PACS: 74.20.Pq Electronic structure calculations;  
74.70.Xa Pnictides and chalcogenides;  
75.10.Lp Band and itinerant models.

Keywords: iron-containing superconductors, FeTe, electronic structure, Fermi surface, chemical bond.