

## 我校磁性掺杂拓扑绝缘体 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 研究取得进展

近年来,拓扑绝缘体因其独特的物理性质及良好的应用前景在凝聚态物理和材料科学领域引起了广泛的研究兴趣,尤其是三维拓扑材料  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  族材料备受关注。由于具有非平庸的自旋和磁电特性,拓扑绝缘体有望在自旋电子学和拓扑量子计算等领域得到应用。然而,要实现这些关键应用的先决条件是在拓扑绝缘体中保持拓扑序的同时引入铁磁序或者超导序。科学家预言通过对  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  族材料进行磁性掺杂可以引入铁磁序,有可能观测到量子化的反常霍尔效应,从而为拓扑绝缘体在器件方面的应用创造可能性。磁性掺杂  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  族材料的实验研究近年取得了突破性进展,然而对于过渡金属掺杂拓扑绝缘体材料的稳定性仍缺乏系统的研究,实验上对铁磁性的报道也存在争议。因而系统地理解磁性原子在拓扑绝缘体中的形成难易程度,存在状态,以及其对体系的电子结构、磁学性质等的影响成为亟待解决的课题。

近年来,姚裕贵教授研究组和合作者发展了判断材料是否拓扑绝缘体的第一性原理方法【*Comp. Phys. Comm.* 183, 1849 (2012)】,并先后预言了在 Half-Heusler 化合物【*Phys. Rev. Lett.* 105, 096404 (2010); *Phys. Rev. B* 82, 235121 (2010)】和 Chalcopyrite 化合物【*Phys. Rev. Lett.* 106, 016402 (2011)】中存在大量的拓扑绝缘体材料,以及硅烯可能实现量子自旋霍尔效应【*Phys. Rev. Lett.* 107, 076802 (2011)】。此外,还预言了二元半导体 InSb 在合理的应变范围内可以转变成拓扑绝缘体【*Phys. Rev. B* 85, 195114 (2012)】。此外,姚裕贵教授应邀撰写了一篇综述文章,介绍了理论上寻找拓扑绝缘体新材料的一般方法,回顾了三维拓扑绝缘体材料方面的研究进展【*Sci. China-Phys. Mech. Astron.* 55, 2199 (2012)】。

在上述研究工作基础上,最近北京理工大学物理学院姚裕贵教授及其博士生张健敏(中国科学院物理研究所)与美国橡树岭国家实验室的朱文光博士、肖笛博士等合作,通过第一性原理计算方法,系统地研究了  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  中的 3d 过渡金属磁性原子(V, Cr, Mn 和 Fe)掺杂,包括掺杂体系的材料稳定性、电子结构特性以及磁学性质等。他们发现引入的磁性原子在  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  材料中倾向于替代位稳定存在,而非实验猜测的间隙存在。同时阐明了本征生长条件下  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  材料的载流子类型及其具体诱因,这一结果为实验发现提供了合理的解释,也为实验上制备出真正绝缘的拓扑材料提供了有力的指导。其次,该工作系统评估了不同磁性原子

的掺杂难易并给出了各种磁性原子掺杂的最优生长条件，以及不同掺杂原子在母体中的稳定价态，同时预测了各种掺杂原子的有效掺杂浓度。他们发现，V 和 Cr 较 Mn 和 Fe 更容易自发形成掺杂，Mn 和 Fe 的掺杂浓度比较有限。在极端 n 型载流子环境下引入 V, Cr, Mn 和 Fe 容易使掺杂原子形成受主，而大部分载流子环境下 V, Cr, Mn 和 Fe 均倾向于中性替代，这对寻找铁磁绝缘体十分有利。该小组随后进行了电子结构研究，计算结果显示，V 和 Mn 掺杂的  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  呈现金属特性，Cr 和 Fe 掺杂体系则仍然是绝缘材料，Cr 和 Fe 掺杂  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  族体系有望成为实现量子化反常霍尔效应的候选材料，但此时由于 Cr 原子 d 轨道和 Se 原子 p 轨道的杂化及原子驰豫，体能隙将变小很多，导致此体系可能只有在低温才可观测到量子化反常霍尔效应。最后通过对磁性拓扑绝缘体系统的磁性耦合研究，澄清了实验中关于 Cr 和 Fe 掺杂  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  材料关于磁性报道的争议，并揭示 Cr 掺杂  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  容易形成铁磁性，而 Fe 掺杂系统则显示弱的反铁磁性。

该工作为当前广泛关注的磁性掺杂拓扑绝缘体系提供了全面、系统的理论研究，为实验上获取铁磁拓扑绝缘体材料提供了系统的评估及必要的理论指导，计算结果对实验上实现量子化反常霍尔效应至关重要，同时为拓扑绝缘体在工业应用上的进一步发展奠定了基础。该工作发表在 *Physical Review Letters* 109, 266405 (2012)，并得到了国家自然科学基金委和科技部的资助。

(全文链接: <http://prl.aps.org/abstract/PRL/v109/i26/e266405>)

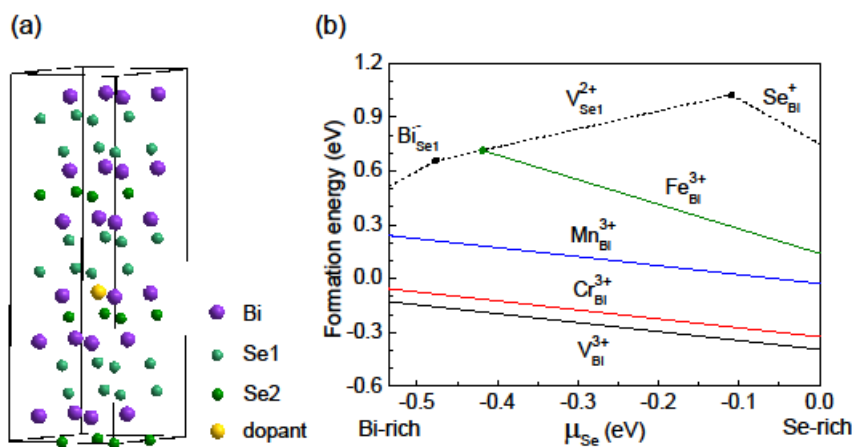


图 1. (a)  $2 \times 2 \times 1$   $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  超胞原子掺杂结构示意图。(b) V, Cr, Mn 和 Fe 掺杂  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  体系最稳定价态的形成能随制备环境(硒化学势)的变化。为比较，虚线给出了  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  中最可

能存在的本征缺陷（硒空位  $V_{Se1}$ 、 $Bi_{Se1}$  和  $Se_{Bi}$  反位）的数值。

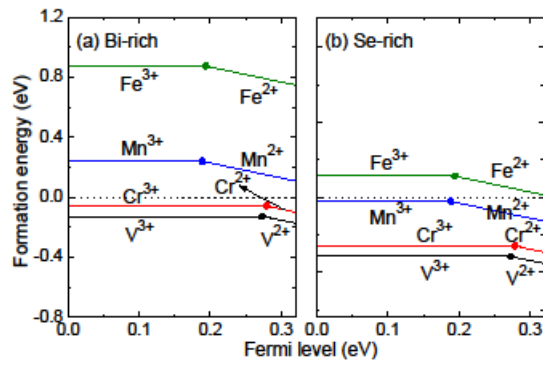


图 2. V, Cr, Mn 和 Fe 掺杂  $Bi_2Se_3$  时不同稳定价态的形成能随体系费米能级的变化。(a) 和(b)分别表示富铋生长和富硒生长两种不同的制备条件。

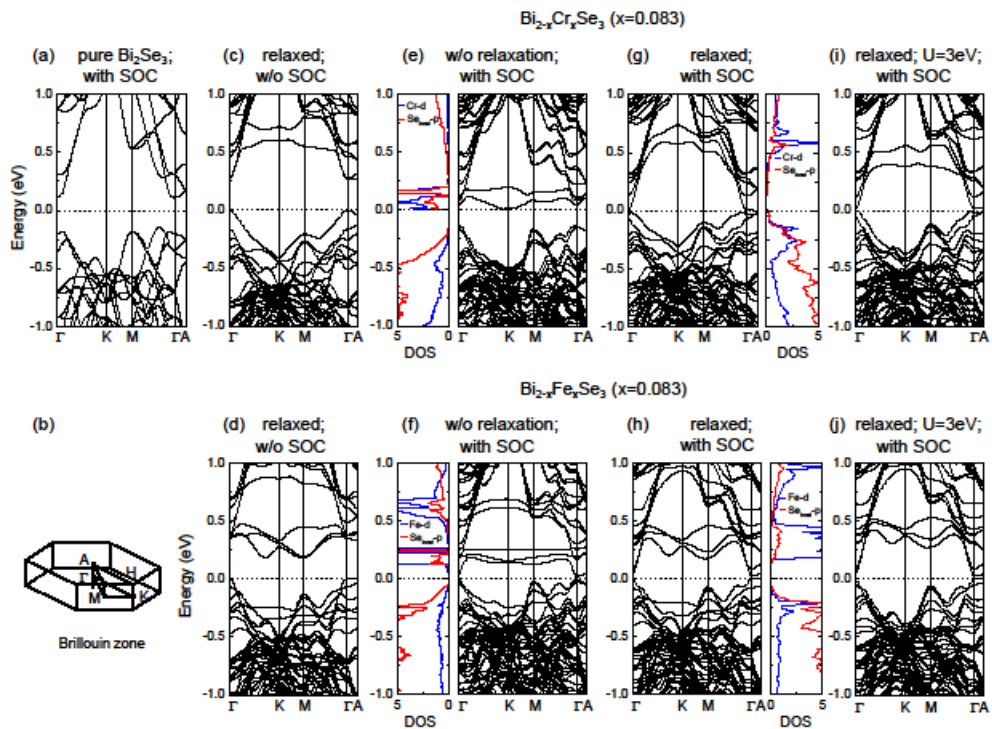


图 3.  $2 \times 2 \times 1$   $Bi_2Se_3$  超胞(a)考虑自旋轨道耦合下的能带图及其(b)布里渊区和高对称点。(c)-(j) Cr 和 Fe 掺杂  $Bi_2Se_3$  体系不同条件下的能带结构。