低维磁性拓扑绝缘体与拓扑半金属

王昊, 牛成旺*, 戴瑛*

山东大学物理学院, 晶体材料国家重点实验室, 济南 250100

* 联系人, E-mail: c.niu@sdu.edu.cn; daiy60@sdu.edu.cn

2020-12-30 收稿, 2021-03-09 修回, 2021-03-16 接受, 2021-03-17 网络版发表

国家自然科学基金(11904205)和山东省自然科学基金(ZR2019QA019, ZR2019MEM013)资助

摘要 磁性与拓扑性之间复杂的相互作用引起了越来越多的关注. 磁性拓扑材料展示了多种新奇的物理效应, 有望应用于未来低功耗高速自旋电子学器件. 本文从量子霍尔效应出发, 回顾了磁性拓扑材料, 包括陈绝缘体、反铁磁拓扑绝缘体、磁性外尔半金属及其他磁性拓扑态等在理论与实验上的进展, 并详细介绍了我们课题组最近几年在磁性拓扑材料方面的理论工作. 这些工作不仅增进了对磁性拓扑态分类的理解, 也提供了实验上可能实现的材料体系.

关键词 磁性拓扑绝缘体, 量子反常霍尔效应, 磁性拓扑半金属, 二维材料

1980年, 德国物理学家von Klitzing等人^[1]在研究低温强场环境下的霍尔效应时发现, 当外加磁场足够强并且样品足够薄时, 霍尔电导将出现量子化的平台, 每个阶梯平台所对应的电阻值精确满足 $\nu \frac{e^2}{h}$, 其中, h 为普朗克常数, e 为电子电量, ν 是一个整数. 这一发现迅速引起了极大的关注, 因为在此之前人们对物质相分类的理解还基于朗道对称性破缺理论, 即每一种物质的相对应于一种自发的对称性破缺, 比如中心反演对称破缺对应于铁电性等. 量子霍尔效应的出现打破了这一认识, 因为不同的电导平台之间具有相同的对称性. 1982年, Thouless等人^[2]提出的TKNN公式显示, 量子化电导平台的大小与体系的陈数(Chern number)有关, 是一个与材料本身拓扑性相关的性质. 这使人们对物质相的理解进入了一个全新的阶段. 拓扑是数学上的一个概念, 这个性质区分了一个连续表面上洞的个数, 并对表面的细节和连续变化不敏感. 如果能带结构中也能找到类似由拓扑数决定的特征, 就可以获得对材料

缺陷、杂质等不敏感的物理性质或量子态. 1982年, Tsui等人^[3]在更高迁移率的III-V化合物半导体界面二维电子气中发现 ν 为某些分数取值的量子霍尔效应, 被称为分数量子霍尔效应. 整数和分数量子霍尔效应的发现分别于1985和1998年获得诺贝尔物理学奖, 向人们揭示了一种全新理解物质态的方式.

量子霍尔效应需要在垂直方向施加一个外磁场来实现量子化的朗道能级, 一般需要数个特斯拉的磁场强度, 极大地限制了它的实际应用. 那么, 是否可能实现不需要外加磁场的量子霍尔效应呢? 对这个问题, 最早在1988年由Haldane^[4]迈出了重要一步, 即在六角石墨烯晶格中, 通过对近邻的格点引入方向相反的磁通, 并考虑次近邻相互作用后, 可以实现手性反常以及非零陈数. 按照块体-边缘的对应关系, 非零的陈数对应手性边缘导电通道, 与量子霍尔效应具有相同的输运现象. 虽然当时石墨烯还没有被合成, 并且人们也不知道如何在六角晶格的子晶格中引入相反的磁通, 但是这个模型揭示了在没有外加磁场的情况下也可以实现

引用格式: 王昊, 牛成旺, 戴瑛. 低维磁性拓扑绝缘体与拓扑半金属. 科学通报, 2021, 66: 2010–2023

Wang H, Niu C W, Dai Y. Low-dimensional magnetic topological insulators and topological semimetals (in Chinese). Chin Sci Bull, 2021, 66: 2010–2023, doi: [10.1360/TB-2020-1687](https://doi.org/10.1360/TB-2020-1687)

量子霍尔效应的可能性,为之后量子反常霍尔效应的发展奠定了理论基础。

2005年,对物质拓扑性的研究迎来另一个新的发展阶段。Kane和Mele^[5,6]提出了著名的KM模型,他们发现,可以在这个模型中实现无带隙的螺旋边缘态,并使用 Z_2 不变量来区分于普通的绝缘体,体系的拓扑非平庸性受时间反演对称性保护。2006年,Bernevig等人^[7]提出BHZ模型,并且理论上预言在HgTe-CdTe量子阱中,当体系的厚度超过一个临界值后会出现s-p能带反转,从而实现量子自旋霍尔效应,即二维拓扑绝缘体。这个理论预测在2007年Molenkamp课题组^[8]的实验中被证实。此后10多年,拓扑材料进入了一个蓬勃发展的时期,形形色色的拓扑量子材料被预言和证实,拓扑量子态也从拓扑绝缘体扩展到金属性材料,如狄拉克半金属、外尔半金属、多重点半金属和拓扑节线半金属等^[9-15]。此外,基于磁性态与拓扑态复杂的相互作用,多种磁性拓扑绝缘体和磁性拓扑半金属相继被提出,例如HgCr₂Se₄^[16]、磁性Heusler合金^[17]、CuMnAs^[18]、Cs₂LiMn₃F₁₂^[19],以及一些其他体系等^[20-24]。这些丰富的拓扑量子态呈现出很多新奇的物理性质,如巨反常霍尔效应、负磁阻、巨磁电阻、极高的载流子迁移率等,将拓扑物理与自旋电子学等紧密地关联起来,为新型电子器件的设计与应用提供了重要基础,并成为当前凝聚态物理和材料科学等领域的研究热点^[25-29]。最近,Bernevig课题组^[30]通过高通量计算的方法建立了磁性拓扑材料的数据库,这极大地方便了对磁性拓扑材料的探索与研究。

1 低维磁性拓扑绝缘体

最近,二维磁性材料引起了人们的广泛关注。之前按照Mermin-Wagner理论^[31],人们普遍认为,在有限温度下长程的铁磁有序性不能在低维体系中存在。然而,最近的实验发现打破了这一传统的认识。2017年,Huang等人^[32]和Gong^[33]的实验分别发现,在CrI₃、Cr₂Ge₂Te₆等层状范德华(vdW)材料中,即使将材料剥离到单层极限,体系也会保持铁磁性,其中磁晶各向异性能在实现长程磁序中起到重要的作用。如果二维铁磁材料本身具有非平庸的能带结构,那么体系就是一种内禀的磁性拓扑绝缘体。

1.1 量子反常霍尔效应及拓扑相变

二维拓扑绝缘体可以看作是两套互为时间反演对

称Haldane模型的叠加,因此当在二维拓扑绝缘体中引入长程铁磁序时,可以破坏其两条螺旋边缘态中的一支,从而实现量子反常霍尔效应^[34]。2010年,Yu等人^[35]预言了在Bi₂Se₃中可以通过Cr掺杂的方法实现量子反常霍尔效应。2013年,薛其坤团队^[36]在实现量子反常霍尔效应的实验中获得重大突破,他们在Cr掺杂的(Bi,Sb)₂Te₃合金中,在30 mK的温度下观察到了量子反常霍尔效应。这是人们探寻量子反常霍尔效应道路上的一个里程碑。目前,有两种方法在拓扑绝缘体中引入磁性。第一种是通过形成铁磁层/拓扑绝缘体异质结,利用磁近邻效应打破拓扑绝缘体中的一条边缘态。目前这种方法在实验上较难实现,因为铁磁层和拓扑层之间电子结构的相互作用比较弱,难以在拓扑绝缘体中诱导足够强的铁磁性。第二种是利用磁性掺杂的方法。这种方法的困难有如下几点:一是要找到合适的长程铁磁耦合机制。一般稀磁半导体中的铁磁性来源于由载流子作为媒介的RKKY型相互作用,这种磁耦合机制无法应用于实现量子反常霍尔效应,因为当块体载流子耗尽时,体系的铁磁性就会消失。二是在实验上要使掺杂的磁性原子均匀分布,不产生缺陷和表面无序,磁性原子也不能聚集形成团簇。三是需要控制掺杂浓度,过高的磁性原子掺杂浓度会显著降低体系的自旋轨道耦合(spin orbital coupling, SOC)强度。这些因素使实验上实现量子反常霍尔效应非常困难。因此,寻找本征的陈绝缘体成为一个值得研究的方向^[37-42]。如果本征的陈绝缘体同时具有较高的居里温度以及较大的带隙,那将成为实现量子反常霍尔效应的理想材料。

层状稀土磷族化合物由于其磁性和热电性而被广泛研究^[43,44]。最近,其性质被拓展到新奇的拓扑态,比如在块体EuCd₂As₂中的磁性外尔半金属态^[45-48]。如图1(a)所示,块体EuCd₂As₂具有空间群为 $P\bar{3}m1$ 三角晶格结构,可以看作五原子层(quintuple layers, QL)沿z方向的堆叠。层间Eu原子按照磁矩反平行的反铁磁构型排列,而层内按磁矩平行的铁磁耦合排布。我们的主要研究对象为一个QL结构,其优化后的晶格常数为4.48 Å,与之前报道的块体结构相同;计算的剥离能为33 meV/Å,与MoS₂的值大概相当,显示出EuCd₂As₂的可剥离性^[39]。与其块体类似,二维EuCd₂As₂中间层的Eu也显示出铁磁耦合方式,Eu的磁矩大小为6.9 μ_B ,电子自旋极化发生在远离费米能级半填满的4f轨道上。如图1(e),(f)所示,自旋向上的能带没有带隙,而自旋向下的能带则打开了一个带隙,在费米能级附近显示出半金属特性。在

图 1 (网络版彩色)EuCd₂As₂的晶体结构、电子与拓扑性^[39]. EuCd₂As₂晶体结构的俯视图(a)和侧视图(b); (c) 六角蜂窝结构的布里渊区; (d) EuCd₂As₂的声子谱; EuCd₂As₂五原子层不包含SOC相互作用能带结构的上自旋分量(e)和下自旋分量(f); (g) EuCd₂As₂五原子层包含SOC相互作用的能带结构; (h) EuCd₂As₂费米能级附近的反常霍尔电导与自旋霍尔电导, 插图显示为贝利曲率与自旋贝利曲率在第一个布里渊区的分布

Figure 1 (Color online) The crystal structure, electronic and topological properties of EuCd₂As₂^[39]. Top view (a) and side view (b) of EuCd₂As₂. (c) Brillouin zone of honeycomb lattice. (d) Phonon spectra of EuCd₂As₂. Band structures of QL (quintuple layers) EuCd₂As₂ without SOC: (e) Spin-up component; (f) spin-down component. (g) Band structures of QL EuCd₂As₂ with SOC. (h) Quantized anomalous Hall conductivity and spin Hall conductivity of EuCd₂As₂ near the Fermi level, and the inset shows the distribution of Berry curvature and spin Berry curvature in the first Brillouin zone

SOC作用下, 体系的磁晶各向异性能显示体系更加倾向于面外磁化. 并且, SOC的作用打开了上自旋通道一个72 meV的带隙, 使得体系存在一个非零的陈数 $C = 1$, 实现了量子反常霍尔效应.

在电场的作用下, 体系的带隙将减小并出现一个闭合再打开的过程, 这通常意味着拓扑相变的发生. 电场强度 $E = 0.2 \text{ V/\AA}$ 下的电子与拓扑性质的研究进一步验证了这个拓扑相变. 在不考虑SOC时, 体系的上下自旋态都是无带隙的; 当考虑SOC作用时, 带隙被打开35 meV, 计算得到的反常霍尔电导为0, 也就是说, 体系占据带的总陈数为0, 因此这个体系不能实现量子反常霍尔效应. 然而, 其自旋陈数不为0, $C_s = (C_+ - C_-) / 2 = 1$, 即EuCd₂As₂中实现了时间反演对称性破缺的量子自旋霍尔效应. 进一步的研究表明, 无带隙的边缘态仍可以存在于时间反演对称性破缺的铁磁序中, 这与受时间反演对称性保护的量子自旋霍尔绝缘体不同, 可以看作一类新的铁磁拓扑绝缘体.

1.2 铁磁拓扑绝缘体

前文介绍了EuCd₂As₂中量子反常霍尔效应与新型铁磁拓扑绝缘体的拓扑相变, 为更好地研究该新型拓扑物态的性质及形成机制, 可以借助六角蜂窝状晶体结构的紧束缚模型^[49]:

$$H = -t \sum c_i^\dagger c_j + i t_{\text{soc}} \sum v_{ij} c_i^\dagger s_z c_j + \lambda_{\text{mag}} \sum \mu_i c_i^\dagger B s c_i, \quad (1)$$

其中, 前两项为KM模型, 第3项表示体系不同的磁态. $\mu_i = \pm 1$ 表示体系具有反铁磁序, 而 $\mu_i = 1$ 表示体系具有铁磁序; $B = B(\sin\theta, 0, \cos\theta)$ 表示不同的磁方向. 通过微扰论, 当磁矩沿着面内方向时, 所有磁量子数 m_z 的交叉能带都会打开带隙. 紧束缚模型分析表明, 此时体系具有非零的拓扑不变量 $Z_2 = 1$ 和无带隙的边缘态. 在材料实现上, Na₂MnPb是一种稳定的二维材料, 其能带结构符合微扰论的分析. Na₂MnPb的晶体结构如图2(a), (b)所示, 具有 $P6_3/m2$ 的空间群结构. 通过计算和比较图2(c)各种磁构型自旋极化总能, 可以确定Na₂MnPb的磁基态为面内铁磁态. 每个Mn原子有 $4.6\mu_B$ 的磁矩, Pb原子有 $0.11\mu_B$ 的磁矩. 尽管Pb上的磁矩远小于Mn, 但也导致了Pb原子p轨道的自旋劈裂. Mn原子以高自旋Mn²⁺离子的形式存在(d^5), Pb原子以Pb²⁺的离子形式存在. 总能研究表明, Na₂MnPb为铁磁基态, 磁各向异性能为10.82 meV/Mn, 远大于此前报道的二维铁磁材料, 比如CrI₃(685.5 $\mu\text{eV/Cr}$)与Fe₃GeTe₂(920 $\mu\text{eV/Fe}$). Na₂MnPb的电子结构如图2(g), (h)所示. 不考虑SOC时, 上下自旋在 Γ 点附近交叉形成节线(nodal-line), 为拓扑节线半金属. 有SOC时, 节线处打开131 meV的带隙, 实现 $Z_2 = 1$ 的铁磁拓扑绝缘体态. 如图2(j)所示, 在SOC导致的带隙中, 有一对明显的无带隙边缘态连接导带和价带, 自旋极化的方向沿着镜面保护的非常平庸拓扑方向, 并沿着体系的两个相反边缘传播, 说明其具有量子自旋霍

图 2 (网络版彩色) Na_2MnPb 的晶体结构、电子与拓扑性^[49]. Na_2MnPb 晶体的俯视图(a)和侧视图(b); (c) 六角蜂窝结构的布里渊区; (d) 极角 θ 与方位角 φ 的示意图; (e) 4 种磁构型的示意图; (f) Na_2MnPb 的声子谱; Na_2MnPb 不考虑自旋轨道耦合(g)和考虑面内磁化(h)的能带结构; Na_2MnPb 的瓦尼尔电荷中心(Wannier charge centers, WCCs)(i)和边缘态(j). Reproduced from Ref. [49] with permission from the Royal Society of Chemistry

Figure 2 (Color online) The crystal structure, electronic and topological properties of Na_2MnPb ^[49]. Top view (a) and side view (b) of monolayer Na_2MnPb ; (c) Brillouin zone of honeycomb lattice; (d) scheme of polar angle θ and azimuth angle φ ; (e) four considered magnetic configurations; (f) phonon spectrum of Na_2MnPb ; band structures of Na_2MnPb without SOC (g) and with in-plane FM state (h); the Wannier charge centers (i) and edge state (j) of Na_2MnPb . Reproduced from Ref. [49] with permission from the Royal Society of Chemistry

尔效应的输运特征.

1.3 反铁磁拓扑绝缘体

1.3.1 反铁磁拓扑材料的发展历史

近期, 反铁磁体系由于强的磁光克尔效应、优异的反常霍尔效应等引起了越来越多的关注^[50-54]. 2010 年, Mong 等人^[55]发现, 当三维反铁磁体系具有时间反演和晶格平移的联合对称性时也可以实现拓扑绝缘体态, 即反铁磁拓扑绝缘体(antiferromagnetic topological insulators, AFM TIs)具有无带隙的边缘态和 $Z_2=1$ 不变量分类. 同时, 他们提出, GdBiPt 中可能存在反铁磁拓扑绝缘体态, 但一直未被实验所验证. 直到 2019 年, 王靖课题组^[56]和段文晖课题组^[57]分别独立预言 MnBi_2Te_4 是三维反铁磁拓扑绝缘体. 薛其坤课题组^[58]和 Chulkov 课题组^[59]于同年分别在实验上验证了 MnBi_2Te_4 的三维反铁磁拓扑绝缘体态. 二维的 MnBi_2Te_4 薄膜也展现出丰富多彩的新奇拓扑性^[60,61]. 张远波课题组^[62]在 5SLs (septuple layers) 的 MnBi_2Te_4 薄膜中, 于 1.4 K 温度下观察到量子反常霍尔效应. 王亚愚课题组^[63]在 6SLs 的 MnBi_2Te_4 薄膜中观察到轴子绝缘体相, 并在外加强磁场下实现了轴子绝缘体到陈绝缘体的拓扑相变. 王健课题组^[64]在 7SLs 和 9SLs 的薄膜中分别观察到陈数为 1 和 2 的陈绝缘体相, 显示出高陈数量子反常霍尔效应. 虽然量子反常霍尔效应具有零电阻的边缘态, 但是在

实际器件中总会不可避免地具有接触电阻. 这种高陈数的量子反常霍尔效应具有更多的零电阻导电通道, 如果能在拓扑电路中将这导电通道并联, 就会有效地减小总电阻. 因此, 高陈数量子反常霍尔效应对集成化的无耗散电路具有重要意义.

1.3.2 非点式对称保护的铁磁拓扑绝缘体

2016 年, Wang 等人^[65]提出, 在二维反铁磁体系中, $\text{FeSe}/\text{SrTiO}_3$ 薄膜中可同时存在量子自旋霍尔效应和超导电性. 2017 年, 我们课题组^[66]基于第一性原理计算预言, 在 H 修饰的 Sn 中可实现二维反铁磁拓扑绝缘体态. 然而, 早在 2013 年, Fang 等人^[67]在理论上证明, 时间反演和晶格平移的联合对称性并不能保护二维反铁磁体系中的拓扑绝缘体特性. 基于对称性分析, 我们发现, 非点式对称性可以保护二维反铁磁绝缘体中的拓扑性, 并给出了如图 3(a) 所示二维正方格子的紧束缚模型^[68]:

$$H = [\text{Re}(M)\tau_x - \text{Im}(M)\tau_y]\sigma_0 - 2t_{\text{in}}(\cos k_x + \cos k_y)\tau_z\sigma_z + t_{\text{soc}}\tau_z(\sigma_y\sin k_x - \sigma_x\sin k_y) + \lambda_{\text{mag}}\tau_z\sigma_z, \quad (2)$$

其中, $M = (t_1 + t_2 e^{ik_y}) \times (1 + e^{-ik_x})$. 当 $t_1 \neq t_2$ 时, 体系破缺时间反演和晶格平移的联合对称性, 但体系具有非点式对称性 $\{C_{2x}|1/2, 0\}$. 当 $\lambda_{\text{mag}} = 0$ 时, 如图 3(b) 所示, 体系为二维狄拉克半金属. 反铁磁序的引入使能带原狄拉克点处打开带隙, 从而实现二维反铁磁拓扑绝缘体.

图3 (网络版彩色)受非点式对称保护的铁磁拓扑绝缘体示意图^[68]. (a) 二维铁磁紧束缚模型的示意图; 无磁(b)和面外反铁磁性(c)的能带结构; 受非点式对称性保护的瓦尼尔电荷中心(d)和边缘态(e); (f) 纳米带的非点式对称性破缺时, 边缘态打开一个带隙; (g) 块体三元含锰复合物的晶体结构; (h) Mn元素反铁磁排布的俯视图; (i) 二维正方晶格的布里渊区; (j) SrMnPb的声子谱

Figure 3 (Color online) Scheme of antiferromagnetic topological insulators protected by nonsymmorphic symmetry^[68]. (a) Scheme of tight binding model of 2D AFM; band structures for non-magnetic (b) and out-of-plane AFM (c), respectively; WCCs (d) and edge states (e) with nonsymmorphic protection; (f) the edge states of nanoribbons open a gap without the protection of nonsymmorphic; (g) the crystal structures of bulk manganese compounds XMnY; (h) top view of Mn atoms with AFM ordering; (i) 2D Brillouin zones for unitcell; (j) phonon dispersions of SrMnPb

同时, 非零的拓扑不变量 $Z_2=1$ 和无带隙的边缘态进一步证明了体系的拓扑性, 如图3(d), (e)所示.

XMnY(X=Sr, Ba; Y=Sn, Pb) QLs为二维反铁磁绝缘体, 具有非点式对称性 $\{C_{2x}|1/2, 0\}$. 与石墨烯、MoS₂等相近的剥离能揭示了XMnY QLs从块体材料中剥离的可能性. 声子谱的计算结果进一步验证了其动力学稳定性, 如图3(j)所示. 研究表明, XMnY中Mn原子具有半满的3d⁵电子构型, 每个Mn原子显示 $5\mu_B$ 磁矩, 磁基态为反铁磁, 且具有相当好的稳定性, 其奈尔温度可高达340 K, 表明了其室温下的潜在应用.

以SrMnPb为例, 如图4(a), (b)所示的能带结构分析表明, 在 Γ 点存在SOC引起的能带反转, 并展示出147 meV的非平庸带隙. 为进一步确定能带的拓扑非平庸特性, 可计算其自旋霍尔电导:

$$\sigma_{xy}^S = e\hbar \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \Omega^S(k), \quad (3)$$

$$\Omega^S(k) = -2\text{Im} \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_{mk} | J_x^S | \psi_{nk} \rangle \langle \psi_{nk} | v_y | \psi_{mk} \rangle}{(E_{nk} - E_{mk})^2},$$

其中, Ω^S 为自旋贝利曲率, $|\psi_{nk}\rangle$ 是哈密顿量本征值为 E_{nk} 的本征矢. 如图4(c)所示, 在绝缘带隙中自旋霍尔电导出现量子化平台, 表明体系的自旋陈数为 $C_s=1$, 即 $Z_2=1$. 除此之外, 瓦尼尔电荷中心进一步证实了其拓扑性, 如图4(d)所示.

旋转磁矩方向可以改变体系的电子结构, 这种方

法也被证明是改变对称性和拓扑性的有效方法. 当反铁磁磁矩从面外旋转到面内时, SrMnPb仍具有非点式对称性 $\{C_{2x}|1/2, 0\}$, 反铁磁拓扑绝缘体性未被破坏. 相反, 当反铁磁构型打破非点式对称性 $\{C_{2x}|1/2, 0\}$ 时, SrMnPb为平庸的金属态, 进一步验证了反铁磁拓扑态受非点式对称的保护. 此外, 应力通常对体系的电子性质和拓扑性具有影响. 研究发现, 直到6%的应力都没有破坏体系的拓扑性, 这使得XMnY体系成为一个具有很强稳定性的潜在反铁磁拓扑绝缘体材料. 金属性边缘态是拓扑性的一个重要特征, 从图4(e)~(h)可以看出, SrMnSn、SrMnPb、BaMnSn和BaMnPb都有一对无带隙的边缘态, 这与计算的拓扑不变量 $Z_2=1$ 是相符的.

二维反铁磁拓扑绝缘体亦可以看作两套具有相反陈数 $C=\pm 1$ 的陈绝缘体叠加, 因此体系的哈密顿量为

$$H_{\text{eff}}(k_x, k_y) = \begin{pmatrix} H_a(k_x, k_y) & H'(k_x, k_y) \\ H'^{\dagger}(k_x, k_y) & H_b(k_x, k_y) \end{pmatrix}, \quad (4)$$

其中, $H_{a/b}(k_x, k_y) = \pm \sigma_z(\mu - \cos k_x - \cos k_y) \pm \sigma_x \sin k_x + \sigma_y \sin k_y$, 为人们熟知的Qi-Wu-Zhang模型, H_a 和 H_b 表示具有相反陈数的量子反常霍尔效应^[34]. $H'(k_x, k_y)$ 可以调控体系的对称性. 当 $H'(k_x, k_y) = t_{ab} \sin k_x [(1 + \cos k_x) \tau_x + \sin k_x \tau_y]$ 时, 体系存在非点式对称性 $\{C_{2x}|1/2, 0\}$, 拓扑不变量为 $Z_2=1$ 且具有无带隙的边缘态, 可以实现二维反铁磁拓扑绝缘体态. 相反, 当 $H'(k_x, k_y) = t_{ab} \cos k_x [\tau_x + \cos(k_x - k_y) \tau_x +$

图4 (网络版彩色)XMnY化合物的电子结构与拓扑性^[68]. SrMnPb区分轨道成分的能带结构: (a) 不考虑自旋轨道耦合; (b) 考虑自旋轨道耦合. (c) 自旋霍尔电导, 插图表示自旋贝利曲率. (d) SrMnPb的瓦尼尔电荷中心. SrMnSn(e)、SrMnPb(f)、BaMnSn(g)和BaMnPb(h)的边缘态
Figure 4 (Color online) The electronic and topological properties of XMnY compounds^[68]. Orbital resolved band structures of SrMnPb: (a) Without SOC; (b) with SOC. (c) Spin Hall conductivity. The inset stands for the Berry curvature. (d) WCCs of SrMnPb. The edge states for SrMnSn (e), SrMnPb (f), BaMnSn (g) and BaMnPb (h), respectively

$\sin(k_x - k_y)\tau_y]$ 时, 体系破缺非点式对称性 $\{C_{2x}|1/2, 0\}$, 拓扑不变量为 $Z_2=1$ 且不具有无带隙的边缘态, 不能实现二维反铁磁拓扑绝缘体态, 再次证明了非点式对称性 $\{C_{2x}|1/2, 0\}$ 可以保护二维反铁磁绝缘体的拓扑性. 基于此, 进一步筛选了类似晶体结构中潜在的二维反铁磁拓扑绝缘体材料^[69]. 这些化合物的化学式如同ABC, 其中A = Li, Na, K, Rb, Cs, Mg, Ca, Sr, Y, La, Ce, Pr, Nd, Tb, Dy, Ho, Yb, Hf, V, Fe, Co, Cu, Al, Ga; B = V, Mn, Fe, Co; C = Si, P, Ge, As, Sn, Sb, Pb, Bi. 在计算的57种候选材料中, 通过对其稳定性、磁基态、能带结构、 Z_2 不变量以及边缘态的研究, 共预测了9种拓扑非平庸材料. 其中RbMnBi是一个具有高达335 meV非平庸带隙的二维反铁磁拓扑绝缘体. 这个材料能带结构的反转发生在布里渊区的 Γ 点, 有一对无带隙的螺旋边缘态连接导带与价带, 与拓扑不变量 $Z_2=1$ 相对应. 计算得到的剥离能为19 meV/Å, 并且体系在6%的双轴应力下仍然保持了拓扑非平庸特性, 显示出潜在的实验合成的可能性以及对外力稳定的拓扑性.

1.4 宽带隙磁性拓扑绝缘体与磁相变

在磁性拓扑量子态中, 磁相变往往与拓扑相变互相结合, 因此可以利用磁性对体系的拓扑性质进行调控^[70,71]. 例如, $MnBi_2Te_4$ 从反铁磁序变到铁磁序时, 其拓扑性质从反铁磁拓扑绝缘体变为外尔半金属^[56,57]; 对 EuB_6 , 通过磁方向的调控, 可以实现拓扑节线半金属和外尔半金属的拓扑相变^[72]. 然而, 对 $EuCd_2Bi_2$ 的研究

却发现, 在不同磁构型以及磁矩方向下, $EuCd_2Bi_2$ 都展示出拓扑绝缘体特性. 这使其具有很强的抵抗外磁场干扰的能力, 对进一步认识和理解磁有序和拓扑物态间的相互作用和影响有一定的意义^[73].

图5展示了 $EuCd_2Bi_2$ 四种磁构型(铁磁/反铁磁, 面内/面外)的能带结构, 其中Eu原子4f电子态是半占据的, 具有 $7\mu_B$ 磁矩. 当不考虑旋轨耦合时, 反铁磁 $EuCd_2Bi_2$ 的自旋向上和自旋向下的能带是简并的. 尽管时间反演对称性破缺, 但是体系仍然保持了空间反演和时间反演的联合对称性, 因此能带结构双重简并, 并且没有净的自旋极化, 体系为反铁磁狄拉克半金属. 铁磁态时, 上下自旋的价带顶与导带底仍然分别在 Γ 点简并, 但上下自旋之间有72.4 meV的劈裂. 对所有磁构型, SOC均会打开750 meV左右的带隙, 这比之前报道的磁性拓扑绝缘体带隙大得多. 该大带隙的形成原因可理解为费米能级处的态主要由Bi原子的 p_x 和 p_y 轨道贡献, 而 p_z 轨道远离费米能级, 即 p_x 和 p_y 轨道形成的 σ 键导致更大的SOC带隙. 相似的机制之前在铋/硅异质结及官能团化的铋烯和锗烯中都有报道^[74-76]. 自旋霍尔电导和瓦尼尔电荷中心的计算显示, 此时体系具有非零的拓扑不变量 $Z_2=1$, 如图6(e), (f)所示. 不同磁构型下金属性边缘态的存在也确认了 $EuCd_2Bi_2$ 是一种可以抵抗外磁场干扰的磁性拓扑绝缘体, 如图6(g), (h)所示. 铁磁和反铁磁 $EuCd_2Bi_2$ 的带隙在磁矩方向发生改变时仅有微小的改变, 进一步验证了 $EuCd_2Bi_2$ 的拓扑性具有很强的抵抗外磁场干扰的能力.

图 5 (网络版彩色)单层EuCd₂Bi₂的电子性质^[73]. EuCd₂Bi₂在不考虑自旋轨道耦合时反铁磁态(a)和铁磁态(e)的能带结构. 考虑自旋轨道耦合时面内反铁磁(b)、面外反铁磁(c)、面内铁磁(f)和面外铁磁(g)的能带结构. 反铁磁(d)和铁磁(h)EuCd₂Bi₂的带隙随极角θ与方位角φ的变化. Reproduced from Ref. [73] with permission from the Royal Society of Chemistry

Figure 5 (Color online) The electronic properties of monolayer EuCd₂Bi₂^[73]. The band structures for EuCd₂Bi₂ without SOC: (a) AFM state; (e) FM state. The band structures for EuCd₂Bi₂ with SOC: (b) In plane AFM; (c) out of plane AFM; (f) in plane FM; (g) out of plane FM. The band gap as a function of θ and φ for AFM state (d) and FM state (h) of EuCd₂Bi₂, respectively. Reproduced from Ref. [73] with permission from the Royal Society of Chemistry

图 6 (网络版彩色)EuCd₂Bi₂的晶体结构与拓扑性^[73]. (a) 块体EuCd₂Bi₂的晶体结构, 五原子层结构如虚线所示; (b) 二维EuCd₂Bi₂五原子层结构的俯视图与侧视图; (c) 六角晶格的布里渊区; (d) 二维EuCd₂Bi₂的声子谱; (e) 面内反铁磁情形下的自旋霍尔电导与反常霍尔电导, 分别对应于自旋陈数为1和陈数为零; (f) 面内反铁磁构型的瓦尼尔电荷中心; 面内反铁磁(g)与面内铁磁(h)构型下的边缘态. Reproduced from Ref. [73] with permission from the Royal Society of Chemistry

Figure 6 (Color online) The crystal structure and topological properties of EuCd₂Bi₂^[73]. (a) The crystal structure for bulk EuCd₂Bi₂. The dashed line shows the quintuple layers. (b) The top view and side view of 2D EuCd₂Bi₂ QLs. (c) The Brillouin zone of honeycomb lattice. (d) The phonon spectrum of 2D EuCd₂Bi₂. (e) The spin Hall conductivity and anomalous Hall conductivity for EuCd₂Bi₂ with in plane AFM configuration corresponding to the spin Chern number 1 and 0, respectively. (f) The WCCs for the in-plane AFM. The edge states for in-plane AFM (g) and in-plane FM (h) configurations, respectively. Reproduced from Ref. [73] with permission from the Royal Society of Chemistry

2 磁性拓扑半金属

2.1 磁性外尔半金属

1928年,狄拉克首先提出了具有相对论效应的狄拉克方程,其形式为 4×4 的复数矩阵,其解为现在所熟知的 Γ 矩阵,本征矢为四分量波函数.1929年,Weyl^[77]指出,狄拉克方程无质量的解描述了一对新粒子,这一对粒子具有相反的手性,这对粒子被称为外尔费米子.此后,人们不断地在自然界中寻找外尔费米子.中微子曾被认为是外尔费米子,但后来发现中微子是有质量的.有理论工作指出^[78],虽然外尔点总是成对存在,但如果在某些特定晶格体系下,能带中无简并的交点恰好在费米能级附近,那么电子的低能运动就可用无质量的外尔方程描述,能带的交点可以看作具有特定手性的外尔费米子,相应的晶体被称为外尔半金属.2003年,Fang等人^[79]提出,外尔点可以看作动量空间的一个磁单极子,他们通过第一性原理计算的方法说明了铁磁金属中外尔费米子贡献反常霍尔效应中的内禀部分.但是,由于铁磁金属的费米面比较复杂,难以将外尔费米子的贡献区分出来.寻找费米面附近具有纯净外尔点的材料成为研究者竞相实现的目标.2011年,Wan等人^[80]通过理论分析证明,烧绿石结构的 $\text{Y}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ 可能是磁性外尔半金属.同年,Xu等人^[16]预言,铁磁尖晶石 HgCr_2Se_4 是外尔半金属.2014年,Weng等人^[81]通过理论计算发现,TaAs、TaP、NbAs和NbP是外尔半金属,并被多个实验工作验证^[82-85],引发了一波对外尔半金属研究的热潮^[86-89].

除了磁性的外尔半金属以外,磁性拓扑半金属态还有许多其他的存在形式^[90].外尔半金属在能带结构上显示为二重简并的能带交点,而磁性狄拉克半金属则具有四重简并的能带交点.除了零维的点外,拓扑半金属能带的线性交叉点还可以在动量空间中形成连续的一维闭合曲线,受体系镜面或非点式对称性的保护,称为拓扑节线半金属^[91,92].节线在某些表面上的投影会形成能量色散非常小的鼓膜状拓扑表面平带,在其中引入电子关联效应或超导配对有望实现高转变温度超导或分数拓扑态等.最近几年,各种形态的磁性拓扑半金属被相继报道.2016年,有研究表明,CuMnAs是受第三类磁空间群保护的磁性狄拉克半金属^[18].2017年,理论计算显示,层状Kagome材料 Mn_3Ge 与 Mn_3Sn 为反铁磁外尔半金属^[93],2019年, LaCl 等稀土卤化物被计算证明为磁性拓扑节线半金属^[94].在实验方面,磁性外尔

半金属相也由Chen课题组^[95]在Kagome晶格的 $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ 中观测到.

2.2 混合外尔半金属和混合节线半金属

除了孤立的外尔点,目前磁性和非磁性拓扑节线半金属均已得到实验工作的验证^[96,97].同时,拓扑节线半金属也从三维拓展到了二维体系.例如,我们理论预言了 Ca_2As 家族为一类忽略自旋轨道耦合的二维拓扑节线半金属材料^[98]. Ca_2As 中的节线受晶体镜面对称性的保护,但其还同时具有空间反演和时间反演对称性,故自旋轨道耦合会在原能带交叉点处打开带隙,节线仅仅在忽略自旋轨道耦合时存在,这也是非磁性二维拓扑节线半金属所面临的普遍问题^[99,100].研究发现,二维磁性体系中可以实现真正的拓扑节线半金属,同时磁化方向可以作为一个变量,构成二维动量空间 (k_x, k_y) 与自旋空间 (θ) 的混合空间(mixed space).基于此,我们提出了混合外尔半金属和混合节线半金属的概念^[71,101].

为了完全表征混合外尔半金属的性质,我们引入整数拓扑电荷: $Q = \frac{1}{2\pi} \int_s \Omega ds$,当闭合曲面包含外尔点时,贝利曲率 $\Omega = (-\Omega_{yy}^{mk}, \Omega_{yx}^{mk}, \Omega_{xy}^{kk})$ 得到非零的通量,如图7(b)所示.在混合空间中,对称性也起着重要的作用,如在时间反演和镜面联合对称性的约束下,混合外尔点(mixed Weyl point)出现在特定的磁化方向,此时混合外尔半金属可以抵抗任何不破坏这种对称性的微扰.而在低对称体系,混合外尔点则往往出现在一般的磁化方向.当体系具有镜面对称性时,节点可能会形成闭合的节线,从而得到混合节线半金属.其拓扑性质可用非平庸的贝利相位 $\gamma = \int_c A dl$ 进行标志,其中 c 表示对闭合环路的积分, $A = i \sum_n^{\text{occ}} \langle u_{kn}^\theta | \nabla u_{kn}^\theta \rangle$ 为贝利联络,occ代表所有的占据态,如图7(c), (d)所示.

如图7(e)~(j)所示,二维蜂窝晶格中p电子的模型可以揭示混合半金属态存在的可能,其紧束缚哈密顿量为

$$H = \sum_{ij} t_{ij} c_i^\dagger c_j + \sum_i (\varepsilon_i I + B \cdot \sigma) c_i^\dagger c_i + H_{\text{soc}}, \quad (5)$$

其中,第一项代表不同子晶格之间 p_x 、 p_y 、 p_z 轨道之间的跃迁, ε_i 是在位能, $B = B(\sin\theta, 0, \cos\theta)$ 为交换场.自旋轨道耦合相互作用强度写作 $H_{\text{soc}} = \xi l \sigma$, σ 代表泡利矩

图 7 (网络版彩色)混合Weyl与节线半金属的特征与模型示意图^[100]. (a) 磁化方向 $\hat{m} = (\sin\theta, 0, \cos\theta)$ 的示意图, θ 表示磁矩方向与 z 方向的夹角;混合外尔半金属(b)和混合节线半金属(c), (d)的示意图; (e) 六角晶格模型的能带结构($\theta=45^\circ$); (f) 六角晶格模型示意图; (g) $\theta=60^\circ$ 时能带结构交点附近的贝利曲率的分布; (h)–(j) 导带底和价带顶、总轨道磁性和Edelstein响应随磁化方向的变化

Figure 7 (Color online) The characteristic and model of mixed Weyl and nodal-line semimetals^[100]. (a) The scheme for the magnetization direction $\hat{m} = (\sin\theta, 0, \cos\theta)$, where θ is the polar angle; the scheme of mixed Weyl semimetal (b) and mixed nodal-line semimetal (c), (d); (e) the band structures for honeycomb lattice ($\theta=45^\circ$); (f) the scheme of honeycomb lattice; (g) the distribution of the Berry curvature around the crossing point when $\theta=60^\circ$; (h)–(j) the VBM, CBM, total orbital momentum and Edelstein response as a function of magnetic directions

阵. 该模型在很大参数范围内都显示为量子反常霍尔绝缘体. 随着 θ 的增加, 导带和价带互相靠近, 并在 $\theta \approx 60^\circ$ 时出现混合外尔点. 继续增加 θ , 带隙打开, 体系的陈数从-1变为0. 当 $\theta \approx 120^\circ$ 时, 得到手性相反的混合外尔点, 体系的陈数从0变为1. 拓扑电荷的分析进一步证明了混合外尔半金属的拓扑性质.

磁场对非磁绝缘拓扑态拓扑性质的调控作用可以进一步揭示混合空间中的拓扑物态. 以TiSe、Na₃Bi和GaBi为研究对象, 没有外加磁场时, 它们为二维拓扑晶体绝缘体或二维拓扑绝缘体^[102–104]. 如图8(a)–(c)所示, 磁场的大小和方向均可以对TiSe、Na₃Bi和GaBi的电子和拓扑性质进行有效调控. 在拓扑相变点, 体系的能带闭合, 带隙打开后体系可以实现陈数 $C=1$ 或2的量子

反常霍尔效应. 而TiSe在 $\theta=90^\circ$ 和Na₃Bi在 $\theta=0^\circ$ 时, 能带闭合后继续增加磁场强度并未打开带隙, 分别实现了混合外尔半金属和混合节线半金属态. 进一步的研究表明, 这两种拓扑态在二维铁磁材料中亦可实现. VOI₂的晶体及能带结构如图8(d)所示, 其原胞内有两个I、1个V和1个O原子. 铁磁序沿面内方向时, 时间反演和镜面的联合对称性保护体系具有交叉型的能带, 即在 Γ 和Y点周围各有两个外尔点. 如图8(e)所示, 这些外尔点具有相同的手性, 当铁磁序的方向反转时可获得相反手性的外尔点, 因此VOI₂可以看作混合外尔半金属. 对混合节线半金属Na₂BiCr, 其晶体及能带结构如图8(g)所示. 当铁磁序沿面外方向时, 体系的节线受到镜面对称性的保护. 如图8(f), (i)所示的边缘态进一步证明了

图 8 (网络版彩色)混合拓扑半金属的电子结构^[100]. TISe(a)、Na₃Bi(b)和GaBi(c)的带隙随磁场强度和磁化方向的变化; VOI₂(d)和Na₂CrBi(g)的能带结构, 插图是相应晶体结构的侧视图; (e) VOI₂的混合外尔半金属信号, 左图为倒空间中带隙的大小, 右图为贝利曲率的分布; (f) VOI₂的边缘态; (h) Na₂CrBi的节线; (i) Na₂CrBi的边缘态

Figure 8 (Color online) Electronic properties of mixed topological semimetals^[100]. The band gap as a function of the strength of magnetic field and magnetic orientations for TISe (a), Na₃Bi (b) and GaBi (c), respectively. The band structures for VOI₂ (d) and Na₂CrBi (g), the inset is the side view of the structures. (e) The signatures of the mixed Weyl points for in-plane magnetized VOI₂, the left panel shows the band gap and the right panel shows the Berry curvature. (f) The edge states of VOI₂. The nodal-line (h) and edge states (i) for Na₂CrBi

VOI₂和Na₂BiCr的拓扑性质.

3 总结

磁性拓扑材料在最近10年中取得了巨大的研究进展. 本文简要介绍了磁性拓扑量子态的发展历程, 包括量子反常霍尔效应、反铁磁拓扑绝缘体、磁性外尔半金属的理论实验进展. 同时, 介绍了最近几年我们课题组在低维磁性拓扑材料方面的理论工作. 总之, 磁性

拓扑量子态展示出丰富的物理现象, 尽管目前其理论体系尚未成熟, 距离真正的应用也有一段距离. 一方面, 复杂的样品制造以及性质表征使新的拓扑材料发展较慢; 另一方面, 较低的实现温度限制了磁性拓扑材料的应用范围. 不过, 近年来在实验和理论上的进展使我们相信, 在不久的将来, 磁性拓扑量子态会对拓扑自旋电子学、信息科学等科学技术领域产生重大推动作用.

参考文献

- 1 van Klitzing K, Dorda G, Pepper M. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized Hall resistance. *Phys Rev Lett*, 1980, 45: 494–497
- 2 Thouless D J, Kohmoto M, Nightingale M P, et al. Quantized Hall conductance in a two-dimensional periodic potential. *Phys Rev Lett*, 1982, 49: 405–408
- 3 Tsui D C, Stormer H L, Gossard A C. Two-dimensional magnetotransport in the extreme quantum limit. *Phys Rev Lett*, 1982, 48: 1559–1562
- 4 Haldane F D M. Model for a quantum Hall effect without Landau levels: Condensed-matter realization of the “parity anomaly”. *Phys Rev Lett*, 1988, 61: 2015–2018

- 5 Kane C L, Mele E J. Z_2 topological order and the quantum spin Hall effect. *Phys Rev Lett*, 2005, 95: 146802
- 6 Kane C L, Mele E J. Quantum spin Hall effect in graphene. *Phys Rev Lett*, 2005, 95: 226801
- 7 Bernevig B A, Hughes T L, Zhang S C. Quantum spin Hall effect and topological phase transition in HgTe quantum wells. *Science*, 2006, 314: 1757–1761
- 8 Konig M, Wiedmann S, Brune C, et al. Quantum spin Hall insulator state in HgTe quantum wells. *Science*, 2007, 318: 766–770
- 9 Hasan M Z, Kane C L. Colloquium: Topological insulators. *Rev Mod Phys*, 2010, 82: 3045–3067
- 10 Qi X L, Zhang S C. Topological insulators and superconductors. *Rev Mod Phys*, 2011, 83: 1057–1110
- 11 Bansil A, Lin H, Das T. Colloquium: Topological band theory. *Rev Mod Phys*, 2016, 88: 021004
- 12 Chiu C K, Teo J C Y, Schnyder A P, et al. Classification of topological quantum matter with symmetries. *Rev Mod Phys*, 2016, 88: 021004
- 13 Ren Y, Qiao Z, Niu Q. Topological phases in two-dimensional materials: A review. *Rep Prog Phys*, 2016, 79: 066501
- 14 Yan B, Felser C. Topological materials: Weyl semimetals. *Annu Rev Condens Matter Phys*, 2017, 8: 337–354
- 15 Armitage N P, Mele E J, Vishwanath A. Weyl and Dirac semimetals in three-dimensional solids. *Rev Mod Phys*, 2018, 90: 015001
- 16 Xu G, Weng H, Wang Z, et al. Chern semimetal and the quantized anomalous Hall effect in HgCr₂Se₄. *Phys Rev Lett*, 2011, 107: 186806
- 17 Wang Z, Vergniory M G, Kushwaha S, et al. Time-reversal-breaking Weyl fermions in magnetic Heusler alloys. *Phys Rev Lett*, 2016, 117: 236401
- 18 Tang P, Zhou Q, Xu G, et al. Dirac fermions in an antiferromagnetic semimetal. *Nat Phys*, 2016, 12: 1100–1104
- 19 Xu G, Lian B, Zhang S C. Intrinsic quantum anomalous hall effect in the kagome lattice Cs₂LiMn₃F₁₂. *Phys Rev Lett*, 2015, 115: 186802
- 20 Jiang K, Zhou S, Dai X, et al. Antiferromagnetic Chern insulators in noncentrosymmetric systems. *Phys Rev Lett*, 2018, 120: 157205
- 21 Shao D F, Gurung G, Zhang S H, et al. Dirac nodal line metal for topological antiferromagnetic spintronics. *Phys Rev Lett*, 2019, 122: 077203
- 22 Young S M, Wieder B J. Filling-enforced magnetic Dirac semimetals in two dimensions. *Phys Rev Lett*, 2017, 118: 186401
- 23 Zhang H, Wang J, Xu G, et al. Topological states in ferromagnetic CdO/EuO superlattices and quantum wells. *Phys Rev Lett*, 2014, 112: 096804
- 24 Xu G, Wang J, Felser C, et al. Quantum anomalous hall effect in magnetic insulator heterostructure. *Nano Lett*, 2015, 15: 2019–2023
- 25 Liu X, Hsu H C, Liu C X. In-plane magnetization-induced quantum anomalous Hall effect. *Phys Rev Lett*, 2013, 111: 086802
- 26 Liu E, Sun Y, Kumar N, et al. Giant anomalous Hall effect in a ferromagnetic Kagome-lattice semimetal. *Nat Phys*, 2018, 14: 1125–1131
- 27 Liu Z, Zhao G, Liu B, et al. Intrinsic quantum anomalous Hall effect with in-plane magnetization: Searching rule and material prediction. *Phys Rev Lett*, 2018, 121: 246401
- 28 Xu Y, Song Z, Wang Z, et al. Higher-order topology of the axion insulator EuIn₂As₂. *Phys Rev Lett*, 2019, 122: 256402
- 29 Zhang R X, Wu F, Das Sarma S. Möbius insulator and higher-order topology in MnBi_{2n}Te_{3n+1}. *Phys Rev Lett*, 2020, 124: 136407
- 30 Xu Y, Elcoro L, Song Z D, et al. High-throughput calculations of magnetic topological materials. *Nature*, 2020, 586: 702–707
- 31 Mermin N D, Wagner H. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic Heisenberg models. *Phys Rev Lett*, 1966, 17: 1133–1136
- 32 Huang B, Clark G, Navarro-Moratalla E, et al. Layer-dependent ferromagnetism in a van der Waals crystal down to the monolayer limit. *Nature*, 2017, 546: 270–273
- 33 Gong C, Li L, Li Z, et al. Discovery of intrinsic ferromagnetism in two-dimensional van der Waals crystals. *Nature*, 2017, 546: 265–269
- 34 Qi X L, Wu Y S, Zhang S C. Topological quantization of the spin Hall effect in two-dimensional paramagnetic semiconductors. *Phys Rev B*, 2006, 74: 085308
- 35 Yu R, Zhang W, Zhang H J, et al. Quantized anomalous Hall effect in magnetic topological insulators. *Science*, 2010, 329: 61–64
- 36 Chang C Z, Zhang J, Feng X, et al. Experimental observation of the quantum anomalous Hall effect in a magnetic topological insulator. *Science*, 2013, 340: 167–170
- 37 Wang Z F, Liu Z, Liu F. Quantum anomalous Hall effect in 2D organic topological insulators. *Phys Rev Lett*, 2013, 110: 196801
- 38 Wu S C, Shan G, Yan B. Prediction of near-room-temperature quantum anomalous Hall effect on honeycomb materials. *Phys Rev Lett*, 2014, 113: 256401
- 39 Niu C, Mao N, Hu X, et al. Quantum anomalous Hall effect and gate-controllable topological phase transition in layered EuCd₂As₂. *Phys Rev B*, 2019, 99: 235119
- 40 Zhao P, Ma Y, Wang H, et al. Room-temperature quantum anomalous hall effect in single-layer CrP₂S₆. *J Phys Chem C*, 2019, 123: 14707–14711
- 41 Otrokov M M, Rusinov I P, Blanco-Rey M, et al. Unique thickness-dependent properties of the van der Waals interlayer antiferromagnet MnBi₂Te₄ films. *Phys Rev Lett*, 2019, 122: 107202
- 42 Sun H, Xia B, Chen Z, et al. Rational design principles of the quantum anomalous Hall effect in superlattice-like magnetic topological insulators. *Phys Rev Lett*, 2019, 123: 096401
- 43 Custers J, Gegenwart P, Wilhelm H, et al. The break-up of heavy electrons at a quantum critical point. *Nature*, 2003, 424: 524–527
- 44 Si Q, Steglich F. Heavy fermions and quantum phase transitions. *Science*, 2010, 329: 1161–1166
- 45 Li H, Gao S Y, Duan S F, et al. Dirac surface states in intrinsic magnetic topological insulators EuSn₂As₂ and MnBi_{2n}Te_{3n+1}. *Phys Rev X*, 2019, 9:

041039

- 46 Ma J Z, Nie S M, Yi C J, et al. Spin fluctuation induced Weyl semimetal state in the paramagnetic phase of EuCd_2As_2 . *Sci Adv*, 2019, 5: eaaw4718
- 47 Hua G, Nie S, Song Z, et al. Dirac semimetal in type-IV magnetic space groups. *Phys Rev B*, 2018, 98: 201116
- 48 Taddei K M, Lin L Y, Sanjeeva L D, et al. Spin-canting driven weyl physics in EuCd_2As_2 . 2020, arXiv: 2012.01555
- 49 Wang H, Mao N, Niu C, et al. Ferromagnetic dual topological insulator in a two-dimensional honeycomb lattice. *Mater Horiz*, 2020, 7: 2431–2438
- 50 Zhang W, Jungfleisch M B, Jiang W, et al. Spin Hall effects in metallic antiferromagnets. *Phys Rev Lett*, 2014, 113: 196602
- 51 Feng W, Guo G Y, Zhou J, et al. Large magneto-optical Kerr effect in noncollinear antiferromagnets Mn_3X ($\text{X} = \text{Rh, Ir, Pt}$). *Phys Rev B*, 2015, 92: 144426
- 52 Jungwirth T, Marti X, Wadley P, et al. Antiferromagnetic spintronics. *Nat Nanotechnol*, 2016, 11: 231–241
- 53 Baltz V, Manchon A, Tsoi M, et al. Antiferromagnetic spintronics. *Rev Mod Phys*, 2018, 90: 015005
- 54 Higo T, Qu D, Li Y, et al. Anomalous Hall effect in thin films of the Weyl antiferromagnet Mn_3Sn . *Appl Phys Lett*, 2018, 113: 202402
- 55 Mong R S K, Essin A M, Moore J E. Antiferromagnetic topological insulators. *Phys Rev B*, 2010, 81: 245209
- 56 Zhang D, Shi M, Zhu T, et al. Topological axion states in the magnetic insulator MnBi_2Te_4 with the quantized magnetoelectric effect. *Phys Rev Lett*, 2019, 122: 206401
- 57 Li J, Li Y, Du S, et al. Intrinsic magnetic topological insulators in van der Waals layered MnBi_2Te_4 -family materials. *Sci Adv*, 2019, 5: eaaw5685
- 58 Gong Y, Guo J, Li J, et al. Experimental realization of an intrinsic magnetic topological insulator. *Chin Phys Lett*, 2019, 36: 076801
- 59 Otrokov M M, Klimovskikh I I, Bentmann H, et al. Prediction and observation of an antiferromagnetic topological insulator. *Nature*, 2019, 576: 416–422
- 60 Hao Y J, Liu P, Feng Y, et al. Gapless surface Dirac cone in antiferromagnetic topological insulator MnBi_2Te_4 . *Phys Rev X*, 2019, 9: 041038
- 61 Chen Y J, Xu L X, Li J H, et al. Topological electronic structure and its temperature evolution in antiferromagnetic topological insulator MnBi_2Te_4 . *Phys Rev X*, 2019, 9: 041040
- 62 Deng Y, Yu Y, Shi M Z, et al. Quantum anomalous Hall effect in intrinsic magnetic topological insulator MnBi_2Te_4 . *Science*, 2020, 367: 895–900
- 63 Liu C, Wang Y, Li H, et al. Robust axion insulator and Chern insulator phases in a two-dimensional antiferromagnetic topological insulator. *Nat Mater*, 2020, 19: 522–527
- 64 Ge J, Liu Y, Li J, et al. High-Chern-number and high-temperature quantum Hall effect without Landau levels. *Natl Sci Rev*, 2020, 7: 1280–1287
- 65 Wang Z F, Zhang H, Liu D, et al. Topological edge states in a high-temperature superconductor $\text{FeSe}/\text{SrTiO}_3(001)$ film. *Nat Mater*, 2016, 15: 968–973
- 66 Niu C, Hanke J P, Buhl P M, et al. Quantum spin Hall effect and topological phase transitions in honeycomb antiferromagnets. 2017, arXiv: 1705.07035
- 67 Fang C, Gilbert M J, Bernevig B A. Topological insulators with commensurate antiferromagnetism. *Phys Rev B*, 2013, 88: 085406
- 68 Niu C, Wang H, Mao N, et al. Antiferromagnetic topological insulator with nonsymmorphic protection in two dimensions. *Phys Rev Lett*, 2020, 124: 066401
- 69 Mao N, Wang H, Hu X, et al. Antiferromagnetic topological insulator in stable exfoliated two-dimensional materials. *Phys Rev B*, 2020, 102: 115412
- 70 Zhang J, Chang C Z, Tang P, et al. Topology-driven magnetic quantum phase transition in topological insulators. *Science*, 2013, 339: 1582–1586
- 71 Hanke J P, Freimuth F, Niu C, et al. Mixed Weyl semimetals and low-dissipation magnetization control in insulators by spin-orbit torques. *Nat Commun*, 2017, 8: 1479
- 72 Nie S, Sun Y, Prinz F B, et al. Magnetic semimetals and quantized anomalous Hall effect in EuB_6 . *Phys Rev Lett*, 2020, 124: 076403
- 73 Wang H, Mao N, Hu X, et al. A magnetic topological insulator in two-dimensional EuCd_2Bi_2 : Giant gap with robust topology against magnetic transitions. *Mater Horiz*, 2021, 8: 956–961
- 74 Zhou M, Ming W, Liu Z, et al. Epitaxial growth of large-gap quantum spin Hall insulator on semiconductor surface. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2014, 111: 14378–14381
- 75 Si C, Liu J, Xu Y, et al. Functionalized germanene as a prototype of large-gap two-dimensional topological insulators. *Phys Rev B*, 2014, 89: 115429
- 76 Niu C, Bihlmayer G, Zhang H, et al. Functionalized Bismuth films: Giant gap quantum spin Hall and valley-polarized quantum anomalous Hall states. *Phys Rev B*, 2015, 91: 041303
- 77 Weyl H. Elektron und Gravitation. I. *Z Physik*, 1929, 56: 330–352
- 78 Nielsen H B, Ninomiya M. The Adler-Bell-Jackiw anomaly and Weyl fermions in a crystal. *Phys Lett B*, 1983, 130: 389–396
- 79 Fang Z, Nagaosa N, Takahashi K S, et al. The anomalous Hall effect and magnetic monopoles in momentum space. *Science*, 2003, 302: 92–95
- 80 Wan X, Turner A M, Vishwanath A, et al. Topological semimetal and Fermi-arc surface states in the electronic structure of pyrochlore iridates.

- [Phys Rev B](#), 2011, 83: 205101
- 81 Weng H, Fang C, Fang Z, et al. Weyl semimetal phase in noncentrosymmetric transition-metal monophosphides. *Phys Rev X*, 2015, 5: 011029
 - 82 Lü B Q, Weng H M, Fu B B, et al. Experimental discovery of Weyl semimetal TaAs. *Phys Rev X*, 2015, 5: 031013
 - 83 Xu S Y, Belopolski I, Alidoust N, et al. Discovery of a Weyl fermion semimetal and topological Fermi arcs. *Science*, 2015, 349: 613–617
 - 84 Huang X, Zhao L, Long Y, et al. Observation of the chiral-anomaly-induced negative magnetoresistance in 3D Weyl semimetal TaAs. *Phys Rev X*, 2015, 5: 031023
 - 85 Yang L X, Liu Z K, Sun Y, et al. Weyl semimetal phase in the non-centrosymmetric compound TaAs. *Nat Phys*, 2015, 11: 728–732
 - 86 Soluyanov A A, Gresch D, Wang Z, et al. Type-II Weyl semimetals. *Nature*, 2015, 527: 495–498
 - 87 Yu R, Wu Q, Fang Z, et al. From nodal chain semimetal to Weyl semimetal in HfC. *Phys Rev Lett*, 2017, 119: 036401
 - 88 Sun Y, Wu S C, Ali M N, et al. Prediction of Weyl semimetal in orthorhombic MoTe₂. *Phys Rev B*, 2015, 92: 161107
 - 89 Wang Z, Gresch D, Soluyanov A A, et al. MoTe₂: A type-II Weyl topological metal. *Phys Rev Lett*, 2016, 117: 056805
 - 90 Zou J, He Z, Xu G. The study of magnetic topological semimetals by first principles calculations. *npj Comp Mater*, 2019, 5: 1–19
 - 91 Kim Y, Wieder B J, Kane C L, et al. Dirac line nodes in inversion-symmetric crystals. *Phys Rev Lett*, 2015, 115: 036806
 - 92 Yu R, Weng H, Fang Z, et al. Topological node-line semimetal and Dirac semimetal state in antiperovskite Cu₃PdN. *Phys Rev Lett*, 2015, 115: 036807
 - 93 Yang H, Sun Y, Zhang Y, et al. Topological Weyl semimetals in the chiral antiferromagnetic materials Mn₃Ge and Mn₃Sn. *New J Phys*, 2017, 19: 015008
 - 94 Nie S, Weng H, Prinz F B. Topological nodal-line semimetals in ferromagnetic rare-earth-metal monohalides. *Phys Rev B*, 2019, 99: 035125
 - 95 Liu D F, Liang A J, Liu E K, et al. Magnetic Weyl semimetal phase in a Kagomé crystal. *Science*, 2019, 365: 1282–1285
 - 96 Bian G, Chang T R, Sankar R, et al. Topological nodal-line fermions in spin-orbit metal PbTaSe₂. *Nat Commun*, 2016, 7: 10556
 - 97 Belopolski I, Manna K, Sanchez D S, et al. Discovery of topological Weyl fermion lines and drumhead surface states in a room temperature magnet. *Science*, 2019, 365: 1278–1281
 - 98 Niu C, Buhl P M, Bihlmayer G, et al. Two-dimensional topological nodal line semimetal in layered X₂Y (X= Ca, Sr, and Ba; Y= As, Sb, and Bi). *Phys Rev B*, 2017, 95: 235138
 - 99 Lu J L, Luo W, Li X Y, et al. Two-dimensional node-line semimetals in a Honeycomb-Kagome lattice. *Chin Phys Lett*, 2017, 34: 057302
 - 100 Feng B, Fu B, Kasamatsu S, et al. Experimental realization of two-dimensional Dirac nodal line fermions in monolayer Cu₂Si. *Nat Commun*, 2017, 8: 1007
 - 101 Niu C, Hanke J P, Buhl P M, et al. Mixed topological semimetals driven by orbital complexity in two-dimensional ferromagnets. *Nat Commun*, 2019, 10: 3179
 - 102 Niu C, Buhl P M, Bihlmayer G, et al. Two-dimensional topological crystalline insulator and topological phase transition in TlSe and TlS monolayers. *Nano Lett*, 2015, 15: 6071–6075
 - 103 Niu C, Buhl P M, Bihlmayer G, et al. Robust dual topological character with spin-valley polarization in a monolayer of the Dirac semimetal Na₃Bi. *Phys Rev B*, 2017, 95: 075404
 - 104 Crisostomo C P, Yao L Z, Huang Z Q, et al. Robust large gap two-dimensional topological insulators in hydrogenated III-V buckled honeycombs. *Nano Lett*, 2015, 15: 6568–6574

Summary for “低维磁性拓扑绝缘体与拓扑半金属”

Low-dimensional magnetic topological insulators and topological semimetals

Hao Wang, Chengwang Niu^{*} & Ying Dai^{*}

State Key Laboratory of Crystal Materials, School of Physics, Shandong University, Jinan 250100, China

^{*} Corresponding authors, E-mail: c.niu@sdu.edu.cn; daiy60@sdu.edu.cn

The complex interactions between topology and magnetism have attracted growing interest in recent years. The magnetic topological materials reveal various exotic physical phenomena and have potential applications for the high-speed, low-energy-consuming spintronic devices. Starting from the quantum Hall effect, we review the theoretical and experimental progress of the magnetic topological materials, including the Chern insulators, the antiferromagnetic topological insulators (AFM TIs), the magnetic Weyl semimetals and other magnetic topological phases. We also introduce our theoretical work on magnetic topological materials in details. These pieces of work not only improve the understanding of the classification of the magnetic topological phases, but also provide ideal material platforms for the experimental realization.

The layered rare-earth pnictides attracted enormous attention owing to their magnetic and thermoelectric properties. Recently, the exotic topological phases have been reported in these compounds. Our theoretical computational results reveal that the quantum anomalous Hall effect can be realized in two-dimensional ferromagnetic insulator, EuCd_2As_2 . The nonzero Chern number and chiral edge states confirm its nontrivial properties. Furthermore, a topological phase transition between QAH and T-broken QSH state can occur under the electric field.

The topological states in antiferromagnets provide an exciting platform for exploring exotic physical phenomena and applications for antiferromagnetic spintronics. We propose the AFM TIs with nonsymmorphic protection in two-dimension. We found that, in contrast to the previously proposed AFM TIs protected by the combination of time-reversal symmetry and half-lattice translation in three dimensions, the combination of two-fold rotation symmetry and half-lattice translation lead to the non-trivial properties, including nonzero spin Chern number, helical edge states and quantized spin Hall conductivity. We theoretically demonstrate that XMnY QIs are a family of material candidates for 2D AFM TIs, and reveal the potential applications in topological AFM spintronics.

We also proposed ferromagnetic topological insulator, and we proved this phase could exist in 2D honeycomb lattice by using perturbation theory and tight-binding model. We find that the monolayer Na_2MnPb is a candidate material with this topological state. The gapless edge states can be preserved even if the time-reversal symmetry is broken. The topological properties are protected by the M_y mirror symmetry. This material can also realize a spin moment orientation dependent insulator to nodal-line semimetal transition, indicating the potential application for the magnetization direction controlled spintronic devices.

Beyond the magnetic topological insulators, topological semimetals are newly emerged topological quantum states. These states can be classified into Dirac semimetals, Weyl semimetals and nodal-line semimetals according to their band structures. Previous work shows that the nodal-ring may open a gap in the presence of SOC, which is a common problem for nonmagnetic materials in three dimensions. To solve this problem, we demonstrated that the topological nodal-line semimetal could be realized in 2D magnets. The spin orientation can be regarded as a new degree of freedom, and can form a mixed 3D complex phase space combined with the 2D crystal momentum. Based on this idea, we proposed the concepts of mixed Weyl semimetals and mixed nodal-line semimetals. Towards the materials realization, we also predicted state host materials VOI_2 and Na_2CrBi for mixed Weyl semimetals and mixed nodal-line semimetals, respectively.

magnetic topological insulators, quantum anomalous Hall effect, magnetic topological semimetals, two-dimensional materials

doi: [10.1360/TB-2020-1687](https://doi.org/10.1360/TB-2020-1687)