



层状 $\text{MnSb}_2\text{Te}_4/\text{Sb}_2\text{Te}_3$ 异质结的拓扑性质

刘水青^{1,2}, 李树宗^{1,2}, 司君山^{1,2}, 张卫兵^{1,2*}

1. 柔性电子材料基因工程湖南省重点实验室, 长沙 410114;

2. 长沙理工大学物理与电子科学学院, 长沙 410114

*联系人, E-mail: zhangwb@csust.edu.cn

收稿日期: 2023-02-25; 接受日期: 2023-05-22; 网络出版日期: 2023-10-09

国家自然科学基金(编号: 11874092)、霍英东教育基金会第十六届高等院校青年教师基金(编号: 161005)和湖南省杰出青年基金(编号: 2021JJ10039)资助项目

摘要 作为一种典型的拓扑态, 量子反常霍尔效应引起了人们的广泛关注. 本文通过第一性原理计算研究了不同层间距时的 $\text{MnSb}_2\text{Te}_4/\text{Sb}_2\text{Te}_3$ 范德瓦尔斯异质结的电子结构及拓扑性质. 结果发现 $\text{MnSb}_2\text{Te}_4/\text{Sb}_2\text{Te}_3$ 体系表现为拓扑平庸相. 而将 MnSb_2Te_4 中Te与Sb原子层距离调节为2.3 Å时, 体系在自旋轨道耦合作用下出现了能带反转, 实现了从拓扑平庸相到拓扑非平庸相的转变. 能带结构和拓扑性质计算表明, 体系陈数为1, 且存在一个14.5 meV的拓扑非平庸带隙、一维手性边缘态和量子化的霍尔电导, 可实现零场下非零陈数的量子反常霍尔效应. 我们的工作为其他磁性范德瓦尔斯体系实现量子反常霍尔效应的研究提供了参考.

关键词 异质结, 堆垛, 能带反转, 量子反常霍尔效应

PACS: 61.50.Ah, 71.15.Mb, 71.27.+a, 75.50.Pp

1 引言

由时间反演对称破缺和自旋轨道耦合引起的量子反常霍尔效应(Quantum Anomalous Hall Effect, QAHE)作为一种典型的拓扑态, 可实现无耗散的一维手征边缘态, 在未来的低功耗或无耗散电子器件应用中具有巨大的潜力^[1-3]. 1998年, 美国物理学家Hal-dane^[4]最先在蜂窝状晶格模型中提出QAHE. 此后, 人们便不断努力寻找新的体系来实现QAHE^[5-13]. 其中, 磁掺杂是实现QAHE最常见的途径之一, 此方法在随后实验中也得到了验证, 2013年, Chang等人^[14]首次在

Cr掺杂 $(\text{Bi,Sb})_2\text{Te}_3$ 的拓扑绝缘体薄膜中观测到了量子化导电平台. 然而, QAHE的观测温度极低仅为2 K左右, 由于掺杂极不易控制, 会引起掺杂不均匀和有序效应^[15]. 除了引入磁性掺杂剂之外^[16], 利用磁近邻效应, 构建磁性绝缘体和拓扑绝缘体异质结结构^[17-20], 是另外一种实现QAHE的常用手段. 目前, 已有实验在此类异质结中成功观测到了QAHE^[21-24], 但观测到的反常霍尔电阻可能会因为界面存在缺陷而无法达到量子化值.

近几年, 内秉磁性拓扑绝缘体 MnBi_2Te_4 (范德瓦尔斯层状化合物)的成功合成也为QAHE的研究提供了

引用格式: 刘水青, 李树宗, 司君山, 等. 层状 $\text{MnSb}_2\text{Te}_4/\text{Sb}_2\text{Te}_3$ 异质结的拓扑性质. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2023, 11: 117311

Liu S-Q, Li S-Z, Si J-S, et al. Topological properties of layered $\text{MnSb}_2\text{Te}_4/\text{Sb}_2\text{Te}_3$ heterojunctions (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2023, 11: 117311, doi: 10.1360/SSPMA-2023-0068

新的契机^[25]. MnBi_2Te_4 具有层内铁磁和层间反铁磁交换相互作用的特性, 且奇偶层表现出不同的磁性及拓扑性^[26,27]. 2019年, 已有实验相继在 MnBi_2Te_4 5层及6层薄膜中发现了较高温度下(4.5 K)存在的量子化霍尔电导^[28,29]. 同年, Ge等人^[30]也发现了7层 MnBi_2Te_4 薄膜下存在的高温(60 K) QAHE. 除Mn-Bi-Te家族之外, 在过渡金属三卤化物^[31,32]和二氮化物^[33]体系中也分别预测了QAHE的存在. 转角石墨烯体系因其奇特的拓扑特性在近几年也备受关注^[34–36], Serlin等人^[37]和Geisenhof等人^[38]先后在实验上揭示了扭角双层石墨烯体系中出现的QAH现象.

近年来二维磁性材料的预测和成功制备为实现QAHE提供了更多潜在的候选体系^[39–41]. 范德瓦尔斯层状磁性材料在设计高质量的铁磁异质结时具有很大的优势^[6]. 如二维范德瓦尔斯铁磁单分子层 CrI_3 的出现, 提供了一种更佳的磁化拓扑绝缘体拓扑表面态的方法^[41]. 另外, 在双层 $\text{CrI}_3/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ 范德瓦尔斯异质结中也发现了体系拓扑非平庸态的存在^[42]. 由于二维材料没有悬挂键, 不受传统异质结的晶格失配约束^[43–46], 并有效避免传统界面中的缺陷, 更好地提供均匀磁场, 有效实现QAHE.

本文则主要关注由二维磁性 MnSb_2Te_4 和非磁 Sb_2Te_3 两种材料剥离得到的单层材料所构成双层范德瓦尔斯异质结构. MnSb_2Te_4 作为三元碲化物 AB_2Te_4 家族中的一员, 具有与 MnBi_2Te_4 相同的晶体结构, 每个基本单元包含了7个原子层, 是通过在 Sb_2Te_3 中插入磁性MnTe层而自发形成的7元层. 当前, 已成功地合成了铁磁态的 MnSb_2Te_4 ^[47], 其单层也被证实是一种具有固有磁性的拓扑平庸铁磁绝缘体^[48]. 同时, Sb_2Te_3 也是一种具有六边形晶体结构的层状材料, 其单层为拓扑平庸的非磁绝缘体. 与单晶 MnSb_4Te_7 的制备类似^[49], 这两种单层材料的结合也更容易生长.

针对 MnSb_2Te_4 体系, 目前已有工作对其电子结构、磁性能及拓扑相进行了相关的研究^[48,50–52]. Ere-meev等人^[48]指出 MnSb_2Te_4 体系在菱形及单斜结构下均表现为铁磁性. 随后, Zhou等人^[50]指出在压缩应变下及改变Sb原子自旋轨道耦合强度时, MnSb_2Te_4 体系表现出外尔半金属特性. Zhang等人^[51]和Li等人^[52]在铁磁序的5层 MnSb_2Te_4 同质结中也发现了QAHE的存在. 此外, Huan等人^[49]指出 MnSb_4Te_7 体系在反铁磁序和铁磁序下也分别表现为拓扑绝缘体及轴子绝缘体.

因此可以期待基于 MnSb_2Te_4 的范德瓦尔斯异质结中蕴含的丰富拓扑特性, 但截至目前, 相关的工作几乎很少看到.

本文构建了双层 $\text{MnSb}_2\text{Te}_4/\text{Sb}_2\text{Te}_3$ 范德瓦尔斯异质结并通过第一性原理计算了其电子结构和拓扑性质. 由于当前实验已经实现了对二维材料原子层间距^[53]及原子键长^[54]的调控, 因此, 通过改变层间距计算其对体系性质的影响, 且发现通过调节界面附近 MnSb_2Te_4 中Te和Sb的原子层距离, 体系发生了有趣的拓扑相变, 实现了零场下非零陈数的量子反常霍尔效应.

2 计算方法

本文所有计算均使用基于密度泛函理论的VASP代码完成^[55,56]. 采用了投影缀加平面波(PAW)方法^[57,58], 使用基于广义梯度近似(GGA)的Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE)交换关联泛函^[59]. 计算采用500 eV的平面波截断能及 $18 \times 18 \times 1$ 的以Gamma点为中心的Monkhorst-Pack方法K点网格. 同时采用了15 Å的真空层来避免相邻层间的相互作用. 对所有的原子坐标都进行了优化, 直至作用在每个原子上的力小于0.01 eV/Å. 除此之外, 为进一步考虑Mn原子的电子关联效应, 计算采用了GGA+U方法^[60], 其中, U_{eff} 大小设置为3 eV. 同时使用了DFT-D3方法^[61]修正层间范德瓦尔斯相互作用. 为了进一步研究体系的拓扑性质, 本文还使用Wannier90构建最大局域化Wannier函数, 并利用Wannier tools软件包^[62,63]计算了陈数、边缘态.

3 结果与讨论

3.1 堆垛结构

MnSb_2Te_4 具有与 MnBi_2Te_4 类似的层状构型, 属 $R\bar{3}m$ 空间群, 每个原胞中包含7个原子层, 按ABC堆垛序排列. 单层 MnSb_2Te_4 及 Sb_2Te_3 均为拓扑平庸绝缘体, 通过计算, 两者的平衡晶格常数分别为4.25和4.30 Å. 选取异质结的晶格常数与 Sb_2Te_3 一致, 为4.30 Å, 晶格失配率为1.2%.

考虑到不同堆垛构型的 $\text{MnSb}_2\text{Te}_4/\text{Sb}_2\text{Te}_3$ 异质结构可能会对体系的电子结构及拓扑性质产生不同的影响, 本文首先构建了两类不同堆垛序的双层 $\text{MnSb}_2\text{Te}_4/$

Sb_2Te_3 磁性范德瓦尔斯异质结, 侧视图如图1所示.

其中AA堆垛构型可由AA'堆垛构型将上层 MnSb_2Te_4 沿c轴进行 180° 对称旋转操作后得到. 通过进一步的计算发现, AA堆垛的基态总能量比AA'堆垛构型低0.9 meV. 对比两者的平衡层间距, 发现AA堆垛的平衡层间距要小于AA'堆垛, 其中AA堆垛构型的平衡层间距 d 为2.99 Å, AA'堆垛构型为3.12 Å. 这种差异的产生主要是由 MnSb_2Te_4 和 Sb_2Te_3 之间的取向力, 即偶极-偶极相互作用造成的. 在AA堆垛构型下, MnSb_2Te_4 和 Sb_2Te_3 之间的偶极矩方向相同, 此时具有吸引力; 在AA'堆垛构型下, MnSb_2Te_4 和 Sb_2Te_3 之间的偶极矩方向相反, 此时具有排斥性, 这也就造成了AA堆垛构型的平衡层间距要小于AA'堆垛构型. Qi等人^[6]在先对 $\text{MnBi}_2\text{Te}_4/\text{Sb}_2\text{Te}_3$ 异质结的研究中也有所讨论.

考虑到双层堆垛之间的相对位移会产生不同的堆垛结构. 我们还以AA堆垛方式为起始位置, 固定下层

Sb_2Te_3 , 将上层 MnSb_2Te_4 按照一定步长沿平面的两个主轴方向平移 $\frac{n}{6}\mathbf{a} + \frac{m}{6}\mathbf{b}$ (n 和 m 取值为0到6, $\mathbf{a}$ 和 $\mathbf{b}$ 为晶格矢量), 共建立36种不同的堆垛构型, 固定平面坐标去优化 z 轴, 并计算其能量, 最后通过与起始位置的能量差值得到堆垛势能面. 如图2(a)所示, AC结构为异质结能量最低的稳态结构, AB为亚稳态结构, 稳态结构比亚稳态结构的能量低3.8 meV, 这两种构型在一定条件下均可稳定存在. 稳态堆垛构型AC的结构在图2(b)中显示.

3.2 电子结构和能带反转

为进一步研究异质结的拓扑性质, 我们着重计算了平衡层间距 d 为2.99 Å的AC稳态构型的能带结构, 计算结果表明, 在考虑自旋极化及自旋轨道耦合作用(SOC)时, 体系存在一个142.4 meV的间接带隙. 通过进一步分析轨道投影能带图发现, 体系费米能级附近主要是由Mn的d轨道和Sb, Te原子的p轨道贡献, 其中Sb原子的p轨道分布在费米能级以上, Te原子的p轨道分布在费米能级以下, 此时体系表现为拓扑平庸相. 之前有相关工作指出Gr/CrI₃异质结构层间范德瓦尔斯间隙的压缩会导致体系出现陈绝缘体态^[64]. 为进一步研究体系是否能够通过调控发生拓扑相变, 接下来我们减小了 MnSb_2Te_4 和 Sb_2Te_3 的平衡层间距, 并计算了其能带结构, 表1给出了平衡层间距 d 和对应带隙的大小. 计算发现随着平衡层间距的减小, 体带隙会随之减小, 体系仍然为拓扑平庸. 当我们固定平衡层间距 d 为2.99 Å, 逐渐增大上层 MnSb_2Te_4 中Sb原子层与Te原子层的垂直距离 d' , 发现 d' 由平衡位置的1.67 Å增大至

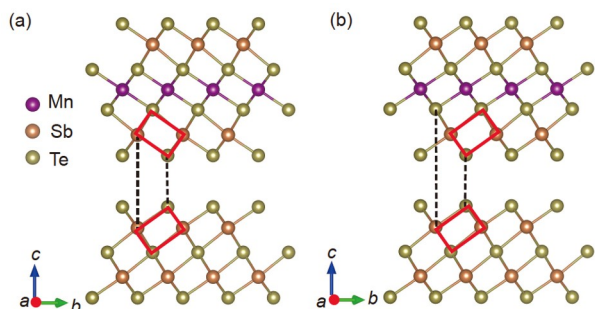


图1 (网络版彩图) 双层 $\text{MnSb}_2\text{Te}_4/\text{Sb}_2\text{Te}_3$ 异质结结构. (a) AA堆垛构型; (b) AA'堆垛构型

Figure 1 (Color online) Double-layer $\text{MnSb}_2\text{Te}_4/\text{Sb}_2\text{Te}_3$ heterostructure. (a) AA stacking configuration; (b) AA' stacking configuration.

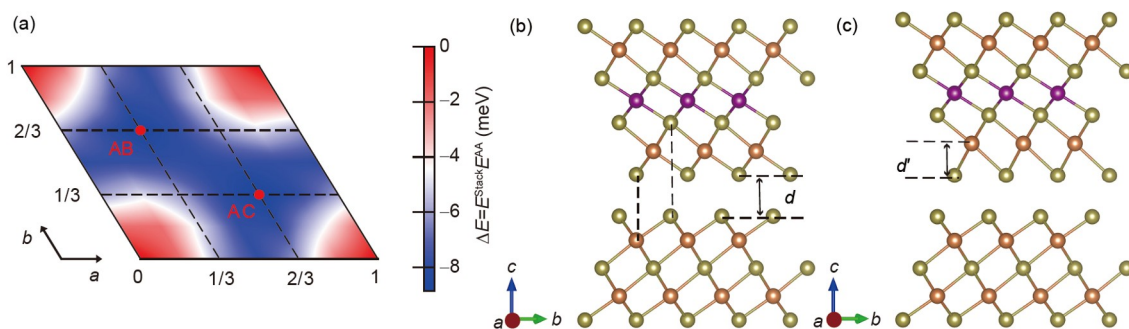


图2 (网络版彩图) (a) AA堆垛构型势能面; (b) AC稳态堆垛结构; (c) 调整上层Te原子层后的结构

Figure 2 (Color online) (a) Potential energy surface of AA stacking configuration; (b) steady-state stacking structure of AC; (c) structure after adjusting the upper Te atomic layer.

表 1 $\text{MnSb}_2\text{Te}_4/\text{Sb}_2\text{Te}_3$ 异质结平衡层间距及对应带隙

Table 1 $\text{MnSb}_2\text{Te}_4/\text{Sb}_2\text{Te}_3$ heterojunction equilibrium layer spacing and corresponding band gap

d (Å)	带隙 (meV)
2.99	142.2
2.90	122.0
2.80	87.5
2.70	76.9
2.60	68.3
2.50	58
2.40	54.3
2.30	51.3

表 2 $\text{MnSb}_2\text{Te}_4/\text{Sb}_2\text{Te}_3$ 异质结上层 MnSb_2Te_4 中 Sb-Te 原子层的垂直距离及对应带隙

Table 2 Vertical distance and corresponding band gap of Sb-Te atomic layer in $\text{MnSb}_2\text{Te}_4/\text{Sb}_2\text{Te}_3$ heterojunction

d' (Å)	带隙 (meV)
1.67	142.2
1.80	133.8
1.90	122.5
2.00	115.6
2.10	110.3
2.20	99
2.30	14.5

2.3 Å 的过程中, 能隙会随着 d' 的变化表现出单调递减的趋势. 在这个过程中, 体系都表现为拓扑平庸, 但当 d' 增大至 2.3 Å 时, 体系出现了能带反转, 并打开了一个非零的全局带隙. 此时体系的结构对应图 2(c). 表 2 给出了 d' 及对应带隙大小.

图 3(a) 和 (b) 分别给出了上层 Sb 原子层与 Te 原子层

垂直距离 d' 为 2.3 Å 时, 考虑 SOC 后异质结 Sb-p 和 Te-p 轨道投影能带图. 当体系只考虑自旋极化不考虑自旋轨道耦合时, 体系存在一个 420.7 meV 的间接带隙. 接下来我们引入了 SOC, 发现 SOC 的引入会导致体能带经历一个由打开到闭合再到打开的过程, 带隙闭合打开的同时伴随着体系在 Γ 点的能带反转, 进一步分析

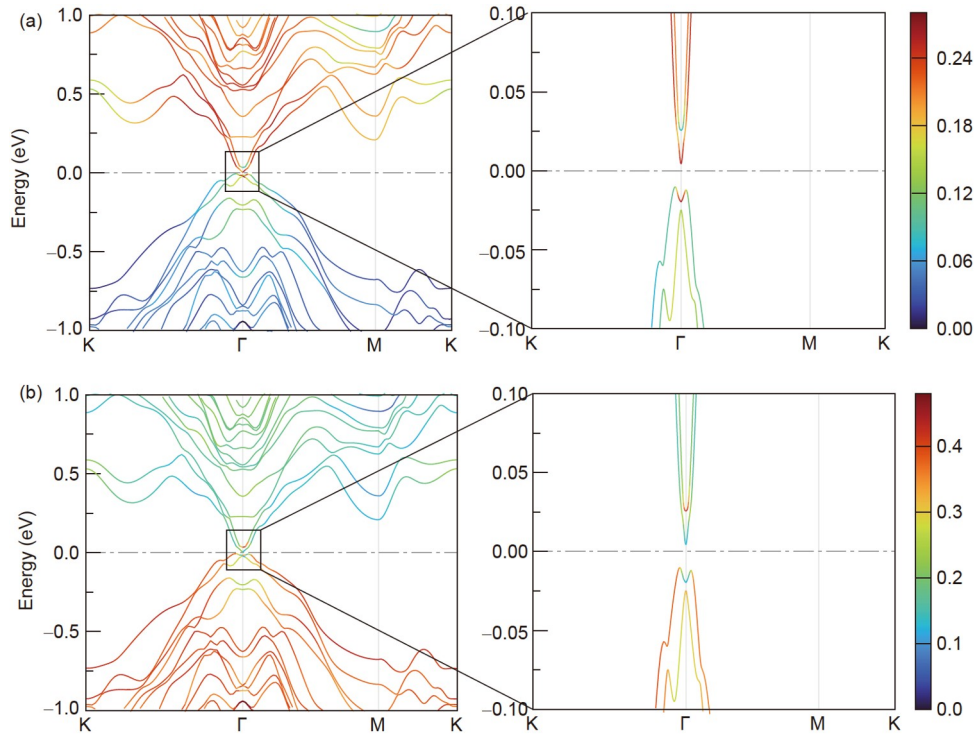

图 3 (网络版彩图) 轨道投影能带图. (a) 和 (b) 分别对应考虑 SOC 后 Sb-p 和 Te-p 的轨道投影能带图 (色阶带表示投影轨道在能带图中的权重)

Figure 3 (Color online) Orbital projection band map. (a) and (b) correspond to the orbital projected band maps of Sb-p and Te-p considering SOC, respectively (the chromatic band represents the weight of the projected orbital content in the band diagram).

轨道投影图发现, 能带反转主要发生在Sb的 p_z 轨道和Te的 p_z 轨道, 这与先前的研究类似^[46,51]. 这意味着SOC诱导体系发生了从拓扑平庸相到拓扑非平庸相的转变, 此时系统打开了一个14.5 meV的非平庸全局带隙.

体系所含重元素的强自旋轨道耦合导致能带结构出现了反转, 而能带结构的变化与界面电荷的转移也密切相关. 通过计算 d' 拉伸前后 $\text{MnSb}_2\text{Te}_4/\text{Sb}_2\text{Te}_3$ 异质结的差分电荷密度展示了 d' 的改变对界面电荷密度分布的影响, 如图4所示. 这里层间电荷密度代表着层间Te原子的价电子轨道(即5p轨道)之间的强杂化, 这种层间Te-Te相互作用可以描述为“准键”, 类似于 PtS_2 体系中的“S-S准键”^[65]. 从图4(a)中可以看出, 在 d' 拉伸前, 层间Te原子之间的电荷分布相对较少, 表明体系此时的层间杂化较弱, 弱的层间杂化使得价带顶的Te- p_z 轨道具有较低的能量态^[66], 这导致体系存在一个大的带隙, 即表2中 d' 为1.67 Å时对应带隙. 由图4(b)可以看出, 当 d' 拉伸至2.3 Å时, 层间Te原子间电荷密度的积累量增加, 导致了体系层间耦合的增强. 层间界面的Te- p_z 轨道相互作用形成成键态和反键态, 其中的反键态位于费米能级附近的价带顶, 在SOC的作用下, 反键态上升到导带底, 因而导致体系发生能带反转, 这一机制与双层 $\text{GeBi}_2\text{Te}_4/\text{GeBi}_2\text{Te}_4$ 异质结研究中的一致^[67].

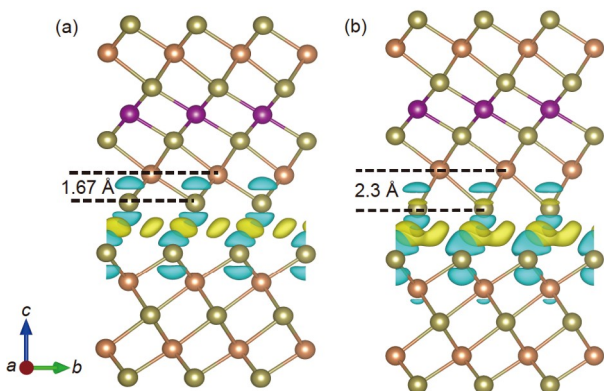


图4 (网络版彩图)差分电荷密度图. (a)和(b)分别对应 d' 拉伸前后 $\text{MnSb}_2\text{Te}_4/\text{Sb}_2\text{Te}_3$ 异质结的层间差分电荷密度. 黄色和绿色区域分别表示电子的积累和耗散

Figure 4 (Color online) The differential charge density. (a) and (b) correspond to the interlayer differential charge density of $\text{MnSb}_2\text{Te}_4/\text{Sb}_2\text{Te}_3$ heterojunction before and after d' stretching, respectively. The yellow and green regions indicate the accumulation and depletion of electrons, respectively.

通过上述分析可知, 上层Sb和Te原子层间距离的改变对界面电荷转移及体系能带结构产生了较大的影响, 接下来进一步计算体系的磁各向异性能(MAE). 一般来说, MAE决定着磁化强度, 而磁化强度越稳定, 数据储存的性能越好^[32]. 在这里, 定义磁各向异性能 $\text{MAE} = E_{\perp} - E_{\parallel}$, 其中 $E_{\perp}$ 和 $E_{\parallel}$ 分别代表垂直磁化轴方向能量与平行磁化轴方向能量. 计算得到MAE大小为-0.026 meV, 面外磁结构比面内磁结构更稳定, 体系的易磁化轴为面外. 一般来讲, 对于陈绝缘体及QAH绝缘体的研究往往假设磁化方向垂直于二维系统的平面(即面外)^[68]. 因此, 这里面外的易磁轴代表着体系可能进一步实现QAHE.

3.3 量子反常霍尔效应

能带反转的出现表明 $\text{MnSb}_2\text{Te}_4/\text{Sb}_2\text{Te}_3$ 异质结很有可能是量子反常霍尔绝缘体. 为进一步研究此时体系的拓扑性质, 通过最大Wannier函数方法构建紧束缚模型拟合能带, 其中投影轨道分别选择Mn原子的d轨道、Bi原子和Te原子的p轨道, 发现紧束缚模型构建得到的能带图和第一性原理计算得到的能带图基本一致, 如图5(b)所示. 在此基础上, 进行后续拓扑性质的相关计算.

基于Wannier函数, 通过对贝里曲率、瓦尼尔电荷中心(Wannier Charge Center, WCC)、反常霍尔电导 σ_{xy} 及边缘态的计算, 验证了体系存在量子反常霍尔效应, 图5(c)给出了沿高对称线的贝里曲率分布, 可以看出其分布在布里渊区 Γ 点附近, 在其他地方等于零. 体系的陈数可以表示为贝里曲率在整个布里渊区的积分^[69]:

$$C_n = \frac{1}{2\pi} \int d^2k F_n,$$

其中, n 是能带指标. 计算结果表明, 体系存在一个 $C=1$ 的非零陈数. 对于二维系统, 陈数与瓦尼尔电荷中心缠绕数表现出相等关系, 接下来我们计算了威尔逊环路(Wilson Loops), 由此可得到瓦尼尔电荷中心的演化曲线, 如图6(a)红色曲线所示, 可以看出演化曲线的缠绕数为1.

贝里曲率在布里渊区 Γ 点附近非零的分布意味着位于带隙内的费米能级的总积分或霍尔电导也必须是非零的. 量子反常霍尔效应的霍尔电导来源于无能隙

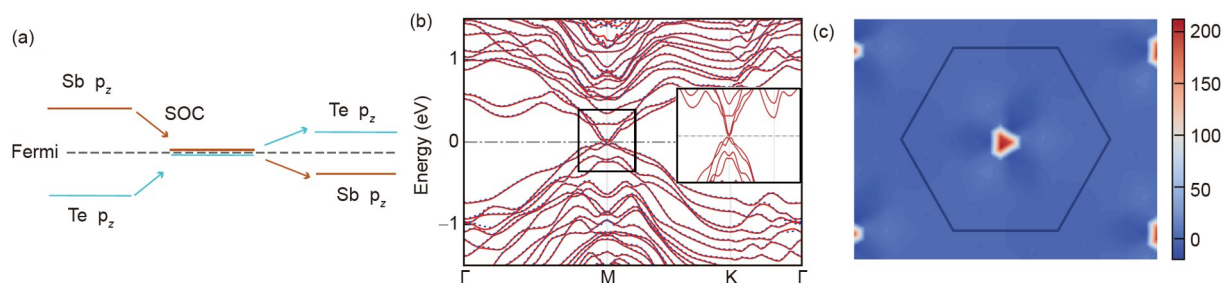


图 5 (网络版彩图) (a) d' 为 2.3 Å 时体系的能带反转示意图; (b) Wannier90 拟合能带图, 红色实线为第一性原理计算能带图, 蓝色散点为紧束缚模型拟合能带图; (c) 动量空间贝里曲率分布图(色阶带表示分布的权重)

Figure 5 (Color online) (a) Schematic diagram of band inversion of the system when d' is 2.3 Å; (b) Wannier90 fitting band map. The red solid line is the band map for first-principles calculation, and the blue scatter is the fitting band map of the tightly bound model. (c) Berry curvature distribution in momentum space (the chromatic band represents the weight of the distribution).

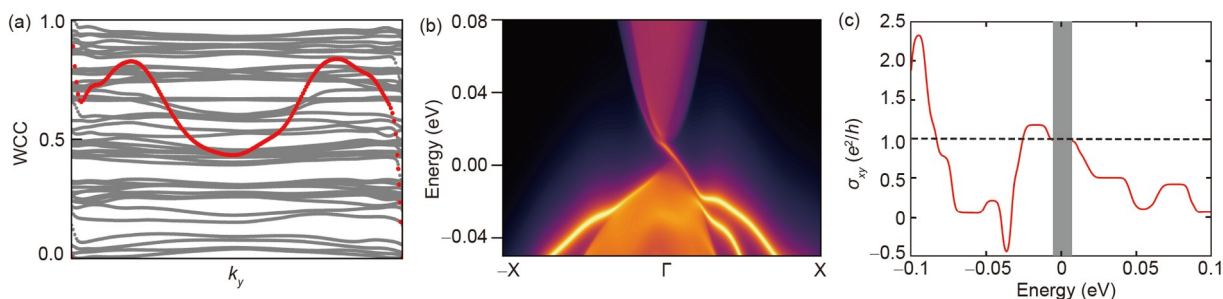


图 6 (网络版彩图) (a) 威耳逊环路, 红色曲线为瓦尼尔电荷中心的演化曲线; (b) 拓扑边缘态; (c) 贝里曲率随费米能级的变化示意图

Figure 6 (Color online) (a) Wilson loops, the red curve is the evolution of WCC; (b) topological edge state; (c) diagram of Berry curvature as Fermi energy level changes.

的具有鲁棒性单向传输的一维手征边缘态。图6(b)和(c)分别给出了体系的边缘态及霍尔电导, 可以看到, 在14.5 meV的拓扑非平庸带隙中存在一个连接导带和价带的一维手征边缘态, 对应 $C=1$ 的陈数。边缘态的存在意味着此时体系量子化整数霍尔电导率的存在, 计算结果显示, 在费米能级附近的能量区间内, 存在一个量子化的霍尔电导平台 $\sigma_{xy}=+e^2/h$ 。以上研究结果证明通过对 MnSb_2Te_4 层中Te原子层的调节, 体系可以实现非拓扑平庸相的转变, 并进一步实现量子反常霍尔效应。

4 结论

综上所述, 本文通过调节 $\text{MnSb}_2\text{Te}_4/\text{Sb}_2\text{Te}_3$ 磁性异质结Te和Sb原子层的距离实现了量子反常霍尔效应。研究表明, 在自旋轨道耦合的作用下, 体系出现了能带反转, 并打开了一个14.5 meV的全局带隙, 实现了从拓扑平庸相到陈数为1的拓扑非平庸相的转变。本文还通过边缘态和霍尔电导的计算证实体系实现了零场下非零陈数的量子反常霍尔效应。本文的工作实现了一种量子反常霍尔效应, 为后续的研究奠定了基础。

参考文献

- Weng H, Yu R, Hu X, et al. Quantum anomalous Hall effect and related topological electronic states. *Adv Phys*, 2015, 64: 227–282
- Ren Y, Qiao Z, Niu Q. Topological phases in two-dimensional materials: A review. *Rep Prog Phys*, 2016, 79: 066501
- He K, Wang Y, Xue Q K. Topological materials: Quantum anomalous Hall system. *Annu Rev Condens Matter Phys*, 2018, 9: 329–344
- Haldane F D M. O(3) nonlinear σ model and the topological distinction between integer- and half-integer-spin antiferromagnets in two dimensions. *Phys Rev Lett*, 1988, 61: 1029–1032

- 5 Jiang H, Qiao Z, Liu H, et al. Quantum anomalous Hall effect with tunable Chern number in magnetic topological insulator film. *Phys Rev B*, 2012, 85: 045445
- 6 Qi S, Gao R, Chang M, et al. Pursuing the high-temperature quantum anomalous Hall effect in $\text{MnBi}_2\text{Te}_4/\text{Sb}_2\text{Te}_3$ heterostructures. *Phys Rev B*, 2020, 101: 014423
- 7 Qi S, Qiao Z, Deng X, et al. High-temperature quantum anomalous Hall effect in n-p codoped topological insulators. *Phys Rev Lett*, 2016, 117: 056804
- 8 Qiao Z, Ren W, Chen H, et al. Quantum anomalous Hall effect in graphene proximity coupled to an antiferromagnetic insulator. *Phys Rev Lett*, 2014, 112: 116404
- 9 Fang C, Gilbert M J, Bernevig B A. Large-Chern-number quantum anomalous Hall effect in thin-film topological crystalline insulators. *Phys Rev Lett*, 2014, 112: 046801
- 10 Haazen P P J, Laloë J B, Nummy T J, et al. Ferromagnetism in thin-film Cr-doped topological insulator Bi_2Se_3 . *Appl Phys Lett*, 2012, 100: 082404
- 11 Hor Y S, Roushan P, Beidenkopf H, et al. Development of ferromagnetism in the doped topological insulator $\text{Bi}_{2-x}\text{Mn}_x\text{Te}_3$. *Phys Rev B*, 2010, 81: 195203
- 12 Chen C Z, Qi J, Xu D H, et al. Evolution of Berry curvature and reentrant quantum anomalous Hall effect in an intrinsic magnetic topological insulator. *Sci China-Phys Mech Astron*, 2021, 64: 127211
- 13 Hu Y, Yue C, Yuan D, et al. Evolution of Weyl nodes in Ni-doped thallium niobate pyrochlore $\text{Tl}_{2-x}\text{Ni}_x\text{Nb}_2\text{O}_7$. *Sci China-Phys Mech Astron*, 2022, 65: 297211
- 14 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
- 15 Luo W, Qi X L. Massive Dirac surface states in topological insulator/magnetic insulator heterostructures. *Phys Rev B*, 2013, 87: 085431
- 16 Liu C, Zang Y Y, Gong Y, et al. Ambi-chiral anomalous Hall effect in magnetically doped topological insulators. *Sci China-Phys Mech Astron*, 2022, 65: 266812
- 17 Kim J, Kim K W, Wang H, et al. Understanding the giant enhancement of exchange interaction in Bi_2Se_3 -EuS Heterostructures. *Phys Rev Lett*, 2017, 119: 027201
- 18 Katmis F, Lauter V, Nogueira F S, et al. A high-temperature ferromagnetic topological insulating phase by proximity coupling. *Nature*, 2016, 533: 513–516
- 19 Otrokov M M, Menshchikova T V, Vergniory M G, et al. Highly-ordered wide bandgap materials for quantized anomalous Hall and magnetoelectric effects. *Science*, 2017, 4: 1–15
- 20 Hou Y, Kim J, Wu R. Magnetizing topological surface states of Bi_2Se_3 with a CrI_3 monolayer. *Sci Adv*, 2019, 5: eaaw1874
- 21 Wei P, Katmis F, Assaf B A, et al. Exchange-coupling-induced symmetry breaking in topological insulators. *Phys Rev Lett*, 2013, 110: 186807
- 22 Alegria L D, Ji H, Yao N, et al. Large anomalous Hall effect in ferromagnetic insulator-topological insulator heterostructures. *Appl Phys Lett*, 2014, 105: 053512
- 23 Lee C, Katmis F, Jarillo-Herrero P, et al. Direct measurement of proximity-induced magnetism at the interface between a topological insulator and a ferromagnet. *Nat Commun*, 2016, 7: 12014
- 24 Tang C, Chang C Z, Zhao G, et al. Above 400-K robust perpendicular ferromagnetic phase in a topological insulator. *Sci Adv*, 2017, 3: 1700307
- 25 Gong Y, Guo J, Li J, et al. Experimental realization of an intrinsic magnetic topological insulator. *Chin Phys Lett*, 2019, 36: 076801
- 26 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
- 27 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
- 28 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
- 29 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
- 30 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
- 31 You J Y, Zhang Z, Gu B, et al. Two-dimensional room-temperature ferromagnetic semiconductors with quantum anomalous Hall effect. *Phys Rev Appl*, 2019, 12: 024063

- 32 Sun J, Zhong X, Cui W, et al. The intrinsic magnetism, quantum anomalous Hall effect and Curie temperature in 2D transition metal trihalides. *Phys Chem Chem Phys*, 2020, 22: 2429–2436
- 33 Kong X, Li L, Leenaerts O, et al. Quantum anomalous Hall effect in a stable 1T-YN₂ monolayer with a large nontrivial bandgap and a high Chern number. *Nanoscale*, 2018, 10: 8153–8161
- 34 Cao Y, Fatemi V, Demir A, et al. Correlated insulator behaviour at half-filling in magic-angle graphene superlattices. *Nature*, 2018, 556: 80–84
- 35 Cao Y, Fatemi V, Fang S, et al. Unconventional superconductivity in magic-angle graphene superlattices. *Nature*, 2018, 556: 43–50
- 36 Liao Y D, Meng Z Y, Xu X Y. Valence bond orders at charge neutrality in a possible two-orbital extended hubbard model for twisted bilayer graphene. *Phys Rev Lett*, 2019, 123: 157601
- 37 Serlin M, Tschirhart C L, Polshyn H, et al. Intrinsic quantized anomalous Hall effect in a moiré heterostructure. *Science*, 2020, 367: 900–903
- 38 Geisenhof F R, Winterer F, Seiler A M, et al. Quantum anomalous Hall octet driven by orbital magnetism in bilayer graphene. *Nature*, 2021, 598: 53–58
- 39 Deng Y, Yu Y, Song Y, et al. Gate-tunable room-temperature ferromagnetism in two-dimensional Fe₃GeTe₂. *Nature*, 2018, 563: 94–99
- 40 Gong C, Li L, Li Z, et al. Discovery of intrinsic ferromagnetism in two-dimensional van der Waals crystals. *Nature*, 2017, 546: 265–269
- 41 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
- 42 Wu Z, Shen Z, Xue Y, et al. Strain-induced topological phase transition and enhanced Curie temperature in MnBi₂Te₄/CrI₃ heterojunction. *Phys Rev Mater*, 2022, 6: 014011
- 43 Arai M, Moriya R, Yabuki N, et al. Construction of van der Waals magnetic tunnel junction using ferromagnetic layered dichalcogenide. *Appl Phys Lett*, 2015, 107: 103107
- 44 Klein D R, MacNeill D, Lado J L, et al. Probing magnetism in 2D van der Waals crystalline insulators via electron tunneling. *Science*, 2018, 360: 1218–1222
- 45 Wang Z, Sapkota D, Taniguchi T, et al. Tunneling spin valves based on Fe₃GeTe₂/hBN/Fe₃GeTe₂ van der Waals heterostructures. *Nano Lett*, 2018, 18: 4303–4308
- 46 Zhu W, Song C, Liao L, et al. Quantum anomalous Hall insulator state in ferromagnetically ordered MnBi₂Te₄/VBi₂Te₄ heterostructures. *Phys Rev B*, 2020, 102: 085111
- 47 Murakami T, Nambu Y, Koretsune T, et al. Realization of interlayer ferromagnetic interaction in MnSb₂Te₄ toward the magnetic Weyl semimetal state. *Phys Rev B*, 2019, 100: 195103
- 48 Ereemeev S V, Otrokov M M, Chulkov E V. Competing rhombohedral and monoclinic crystal structures in MnPn₂Ch₄ compounds: An *ab-initio* study. *J Alloys Compd*, 2017, 709: 172–178
- 49 Huan S, Zhang S, Jiang Z, et al. Multiple magnetic topological phases in bulk van der Waals crystal MnSb₄Te₇. *Phys Rev Lett*, 2021, 126: 246601
- 50 Zhou L, Tan Z, Yan D, et al. Topological phase transition in the layered magnetic compound MnSb₂Te₄: Spin-orbit coupling and interlayer coupling dependence. *Phys Rev B*, 2020, 102: 085114
- 51 Zhang H, Yang W, Wang Y, et al. Tunable topological states in layered magnetic materials of MnSb₂Te₄, MnBi₂Se₄ and MnSb₂Se₄. *Phys Rev B*, 2021, 103: 094433
- 52 Li P, Yu J, Wang Y, et al. Electronic structure and topological phases of the magnetic layered materials MnBi₂Te₄, MnBi₂Se₄ and MnSb₂Te₄. *Phys Rev B*, 2021, 103: 155118
- 53 Ding Y, Zeng M, Zheng Q, et al. Bidirectional and reversible tuning of the interlayer spacing of two-dimensional materials. *Nat Commun*, 2021, 12: 5886
- 54 Pei C, Xia Y, Wu J, et al. Pressure-induced topological and structural phase transitions in an antiferromagnetic topological insulator. *Chin Phys Lett*, 2020, 37: 066401
- 55 Kresse G, Furthmüller J. Efficiency of *ab-initio* total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set. *Comput Mater Sci*, 1996, 6: 15–50
- 56 Kresse G, Furthmüller J. Efficient iterative schemes for *ab initio* total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Phys Rev B*, 1996, 54: 11169–11186
- 57 Blöchl P E. Projector augmented-wave method. *Phys Rev B*, 1994, 50: 17953–17979
- 58 Kresse G, Joubert D. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method. *Phys Rev B*, 1999, 59: 1758–1775

- 59 Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple. *Phys Rev Lett*, 1996, 77: 3865–3868
- 60 Dudarev S L, Botton G A, Savrasov S Y, et al. Electron-energy-loss spectra and the structural stability of nickel oxide: An LSDA+U study. *Phys Rev B*, 1998, 57: 1505–1509
- 61 Grimme S, Antony J, Ehrlich S, et al. A consistent and accurate *ab initio* parametrization of density functional dispersion correction (DFT-D) for the 94 elements H-Pu. *J Chem Phys*, 2010, 132: 154104
- 62 Mostofi A A, Yates J R, Lee Y S, et al. wannier90: A tool for obtaining maximally-localised Wannier functions. *Comput Phys Commun*, 2008, 178: 685–699
- 63 Wu Q S, Zhang S N, Song H F, et al. WannierTools: An open-source software package for novel topological materials. *Comput Phys Commun*, 2018, 224: 405–416
- 64 Zhang J, Zhao B, Zhou T, et al. Strong magnetization and Chern insulators in compressed graphene/CrI₃ van der Waals heterostructures. *Phys Rev B*, 2018, 97: 085401
- 65 Zhao Y, Qiao J, Yu P, et al. Extraordinarily strong interlayer interaction in 2D layered PtS₂. *Adv Mater*, 2016, 28: 2399–2407
- 66 Zhu W, Song C, Bai H, et al. High Chern number quantum anomalous Hall effect tunable by stacking order in van der Waals topological insulators. *Phys Rev B*, 2022, 105: 155122
- 67 Peng R, Ma Y, Wang H, et al. Stacking-dependent topological phase in bilayer MBi₂Te₄ (M=Ge, Sn, Pb). *Phys Rev B*, 2020, 101: 115427
- 68 Sheng X L, Nikolić B K. Monolayer of the 5d transition metal trichloride OsCl₃: A playground for two-dimensional magnetism, room-temperature quantum anomalous Hall effect, and topological phase transitions. *Phys Rev B*, 2017, 95: 201402
- 69 Yao Y, Kleinman L, MacDonald A H, et al. First principles calculation of anomalous hall conductivity in ferromagnetic bcc Fe. *Phys Rev Lett*, 2004, 92: 037204

Topological properties of layered MnSb₂Te₄/Sb₂Te₃ heterojunctions

LIU Shui-Qing^{1,2}, LI Shu-Zong^{1,2}, SI Jun-Shan^{1,2} & ZHANG Wei-Bing^{1,2*}

¹ Hunan Provincial Key Laboratory of Flexible Electronic Materials Genome Engineering, Changsha 410114, China;

² School of Physics and Electronic Sciences, Changsha University of Science and Technology, Changsha 410114, China

As a typical topological state, quantum anomalous Hall effect has attracted wide attention. In this paper, the electronic structure and topological properties of MnSb₂Te₄/Sb₂Te₃ van der Waals heterojunction at different interlayer spacing are studied by first-principles calculation. It is found that MnSb₂Te₄/Sb₂Te₃ system behaves as a topologically trivial phase. By adjusting the distance between Te and Sb atomic layer in MnSb₂Te₄ to 2.3 Å, band inversion occurs in the system under the action of Spin-orbit coupling, and the transformation from topologically trivial phase to topologically nontrivial phase is realized. The calculation of band structure and topological properties shows that the Chern number of the system is 1. Moreover, there exists a 14.5 meV topological nontrivial band gap, a chiral edge state and quantized Hall conductance, which can realize the quantum anomalous Hall effect of nonzero Chern number in zero field. Our work provides a reference for other magnetic van der Waals systems to realize quantum anomalous Hall effects.

heterojunction, stacking, band inversion, quantum anomalous Hall effect

PACS: 61.50.Ah, 71.15.Mb, 71.27.+a, 75.50.Pp

doi: [10.1360/SSPMA-2023-0068](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2023-0068)