磁性半金属EuB6和量子反常霍尔效应研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/8525.html

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

拓扑半金属的研究一直是凝聚态物理的前沿热点研究之一。根据能带交叉点的简并度和形状，拓扑半金属材料可以进一步细分为：四度简并点的狄拉克半金属，二度简并点的外尔半金属和nodal-line半金属等。近年来，研究人员已经在非磁性材料中发现了大量的拓扑半金属材料，例如狄拉克半金属Na_3Bi和Cd_3As_2，外尔半金属TaAs和nodal-
line半金属Cu_3
PdN。通过破缺特定的对称，由对称性保护的拓扑半金属态可以转化为其他拓扑半金属态或者有能隙的拓扑态，例如，破缺时间反演对称，狄拉克半金属会转化成外尔半金属；破缺镜面对称，nodal-line半金属会转化成外尔半金属。尽管磁性体系拥有更加丰富的磁空间群对称，但探索磁有序和拓扑半金属之间的关系却鲜有报道。同时，与“硬磁”材料相比，由于具有较低的磁各向异性能，“软磁”材料可以通过调节温度或外场等简易手段来实现多个不同的磁序态，为人们提供了一个理想的途径来调控体系的磁对称性和拓扑性质。

最近，中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家研究中心特聘研究员王志俊、研究员翁红明和方忠，与香港科技大学教授戴希和美国斯坦福大学博士后聂思敏等人合作，通过第一性原理计算和低能有效模型分析，预言“软铁磁”材料
EuB_6
可以通过改变磁矩的取向来实现多种拓扑半金属态。已有的实验结果表明，随着温度的降低，两个铁磁相(磁分别
平行001方向和111方向)相继出现。
在铁磁相变温度附近，EuB_6具有非常丰富的输运性质，如金属-
绝缘体转变，大的负磁阻等。计算结果显示
顺磁EuB_6
是本征半导体，且它的导带底和价带顶都在Z点（图1d），这与已有的实验结果一致。当考虑铁磁序后，自旋向上态的能隙减小而自旋向下态的能隙增大，导致了能带反转仅仅发生在自旋向上的态（图1a和1e）。

考虑自旋-轨道耦合后，非平庸的拓扑不变量χ
=1意味着该体系的能隙不能全部打开。根据体系的磁对称性，该体系可以是nodal-
line半金属
（图1b）或者外尔半
金属（图1c）。具体而言，当磁矩平行[00
1]方向，EuB_6是由镜面对称性Mz保护的nodal-line半金属（图2a）。当铁磁序平行[111]方向，体系的镜面对称性都被破缺了，nodal-line打开能隙。但是，三对外尔点被(T C_{2}^{1overline{1}0,01 overline{1}, 10

overline{1}})分别束缚在$k_x=k_y$，$k_y=k_z$，和$k_z=k_x$
平面（图2b和2c）。当铁磁序平行[110]方向时，外尔点和nodal-line共存于EuB_6（图2d）。

除了观测非平庸的表面态（图2e-2h），人们在磁性半金属也可以测量反常霍尔电导。对于磁性外尔半金属，反常霍尔电导 (sigma_{x y}) 近似等于(frac{Delta k_{Z}^{W}}{2 pi}
frac{e^{2}}{h})，其中(Delta
k_{Z}^{W})是投影到z轴的正负外尔点间的
距离。EuB_6
中计算的反常霍尔电导如图3a和3b所
示。此外，如果把EuB_6
材料制成有限厚度的[111]方向排列的量子阱，可以实现量子化的反常霍尔效应（图3c和3d）。有意思的是，EuB_6
薄膜已经在实验上成功制备，因此量子化的反常霍尔效应将来有可能在EuB_6薄膜上实现。

该项工作近期发表在《物理评论快报》（*Phys. Rev. Lett.* 124, 076403 (2020)）上。参与该工作合作研究的还包括马普学会固体化学物理学研究所研究员孙岩和美国斯坦福大学教授Fritz B.
Prinz。此项工作得到国家自然科学基金委、科技部、王宽诚基金和中科院等的支持。

图1：（a）铁磁相下，自旋向上态和自旋向下态具有相反的有效交换劈裂，导致能带反转仅发生在自旋向上的态。考虑自旋轨道后，该体系可以成为nodal-
line半金属（b）或者磁性外尔半金属
（c）。（d）顺磁EuB_6
的mBJ能带结构。（e）不考虑自旋轨道耦合时，铁磁EuB_6的GGA+U能带结构。

图2：（a-d）铁磁EuB_6的nodal-
line（绿色线）
和外尔点（蓝色和红色点分别代表电荷+1和-1）。（e-h）铁磁EuB_6的非平庸表面态。

图3：（a-b）计算得到的铁磁EuB_6
的反常霍尔电导。（c）Z点能量随着薄膜厚度的演化。（d）量子化的霍尔电导随着薄膜厚度的演化。

研究团队单位：物理研究所

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发