

Ti 掺杂单层 LiMgP 的磁电和拓扑性质调控*

刘祥林 张洁 丁守兵[†] 毋志民[‡]

(重庆师范大学物理与光电工程学院, 重庆 401331)

(2026 年 3 月 31 日收到; 2026 年 5 月 3 日收到修改稿)

磁性拓扑材料因其独特的能带结构和贝里曲率诱导的量子输运现象, 为低功耗自旋电子学器件的发展提供了全新平台. 本文基于密度泛函理论的第一性原理计算, 系统研究了 Ti 掺杂单层 LiMgP 的结构稳定性、磁基态、电子结构和拓扑性质. 结果表明, 该体系具有良好的热力学和动力学稳定性. 磁性微观机制分析揭示, Ti 原子以 Ti^{2+} 形式处于配体 P^3 组成的晶体场中心, 两个 3d 电子自旋平行占据自旋向上通道, 形成稳定的铁磁基态, 居里温度为 97 K. 在不考虑自旋-轨道耦合时, 体系表现为具有 100% 自旋极化率的铁磁 Weyl 半金属; 引入自旋-轨道耦合后, Weyl 点处打开能隙, 体系发生拓扑绝缘体相变, 并伴随着量子反常霍尔效应的出现. 同时, 费米能级附近的贝里曲率驱动了显著的反常能斯特效应, 反常能斯特系数最高可达到 $1.54 \text{ A}/(\text{m}\cdot\text{K})$, 远超传统热电材料. 这些结果表明 Ti 掺杂单层 LiMgP 是自旋-轨道耦合诱导的磁性拓扑材料, 兼具量子反常霍尔效应和反常能斯特效应, 为探索低功耗自旋电子学和高效热电转换提供了理想平台.

关键词: 第一性原理计算, Ti 掺杂 LiMgP, 量子反常霍尔效应, 反常能斯特效应**DOI:** 10.7498/aps.75.20260444**CSTR:** 32037.14.aps.75.20260444

1 引言

随着传统半导体器件逐渐逼近物理极限, 低功耗电子学器件的研究已成为凝聚态物理与材料科学领域研究的前沿热点. 拓扑量子材料因其独特的电子结构和拓扑表面态, 为实现高效率、低功耗的自旋电子学器件提供了全新平台^[1-3]. 特别是当磁性拓扑材料能带结构相互耦合时, 材料体系中会涌现出一系列丰富的量子输运现象, 如量子反常霍尔效应、反常能斯特效应及拓扑磁光效应等^[4-6]. 这些效应源于动量空间中贝里曲率诱导的内禀机制, 为无耗散自旋输运和高效热-电转换开辟了新的途径, 推动着自旋电子学与热电领域的快速发展^[7-9].

近年来, 磁性拓扑材料的研究取得了重要进

展. 在实验方面, $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ ^[10] 等笼目结构中观测到了巨大的反常霍尔效应和反常能斯特效应, 揭示了拓扑能带与磁性相互作用的丰富物理内涵; MnBi_2Te_4 ^[11] 体系中则发现了由非共线自旋结构诱导的拓扑霍尔效应与拓扑能斯特效应, 凸显了贝里曲率在磁输运中的关键作用. 在理论方面, 第一性原理计算系统阐明了内禀机制与外在散射机制对反常输运性质的贡献^[12,13]. 这些研究为探索新型磁性拓扑材料、理解其输运性质奠定了坚实基础. 在众多材料体系中, Half-Heusler 化合物因其结构高度有序、物性可调性强, 成为探索磁性拓扑物态的理想平台.

I-II-V 族 Half-Heusler 化合物因独特的晶体结构和可控磁电性质, 受到广泛关注, 其晶体结构属于 $F\bar{4}3m$ 空间群, 呈现出高度有序的面心立方晶格

* 国家自然科学基金 (批准号: 62474027)、重庆市自然科学基金 (批准号: CSTB2024NSCQ-MSX0891, CSTB2025NSCQ-GPX0252) 和重庆市教委科学技术研究计划重点项目 (批准号: KJZD-K202300512) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: shoubingding@cqu.edu.cn

[‡] 通信作者. E-mail: zmwu@cqu.edu.cn

结构. 三维 I-II-V 族化合物部分已被实验合成, 表现出良好的稳定性和半导体性质, 理论工作进一步预测了其在热输运与拓扑相变方面的潜力^[14–16]. 随着材料低维化的研究深入, 二维 I-II-V 族如 LiMgAs 等, 因具有与硅烯类似的晶体结构, 并表现出优异的拓扑催化、热电输运和光电等性质^[17–19]. 特别是 Cr, Mo 等过渡金属掺杂的二维 I-II-V 族化合物^[20,21] 呈现自旋无能隙半导体特征并具有量子反常霍尔效应, 证实了该体系在二维磁性拓扑材料研究中的重要价值. 近年来, Ti 掺杂对二维材料电子性质的调控亦引起关注, 已有研究报道了相关体系的一些进展^[22,23], 但 Ti 掺杂在二维 I-II-V 族化合物中诱导的磁性、拓扑相变及量子输运行为仍缺乏系统探索.

基于此, 本文采用基于密度泛函理论的第一性原理计算方法, 系统研究 Ti 掺杂单层 LiMgP 的结构稳定性、磁基态、电子结构和拓扑输运性质. 声子谱和分子动力学模拟计算表明材料具有良好的热力学和动力学稳定性, 通过磁交换耦合常数分析了磁性微观机制, 通过自旋-轨道耦合相互作用调控了体系的电子结构与拓扑性质, 并进一步发现贝里曲率相关的反常热输运响应. 本研究揭示了 $\text{Li}_{12}\text{Mg}_{10}\text{Ti}_2\text{P}_{12}$ 具有自旋-轨道耦合诱导的量子反常霍尔效应和反常能斯特效应, 为二维磁性拓扑材料在低功耗自旋电子学和热电技术中的潜在应用提供了理论参考.

2 计算方法

利用基于密度泛函理论的 (density functional theory, DFT)^[24] 的 VASP (Vienna *ab initio* simulation package)^[25] 软件包进行第一性原理计算, 电子和原子核之间的相互作用通过投影缀加平面波 (projector augmented wave, PAW)^[26] 方法描述, 电子间的交换关联效应则采用广义梯度近似 (generalized-gradient approximation, GGA) 框架下的 PBE (Perdew-Burke-Ernzerh) 泛函处理^[27,28]. 平面波截断能设置为 550 eV, 自洽循环的总能量收敛标准为 1×10^{-6} eV. 为避免层间周期性相互作用, 沿垂直方向设置了 15 Å 的真空层. 结构优化和性质计算都采用的以 Γ 点为中心的 Monkhorst-Pack 方案对布里渊区 (Brillouin zone) 进行采样, K 网格点取为 $9 \times 9 \times 1$. 结构优化过程中所有原子

均允许弛豫, 直到每个原子所受的力小于 1×10^{-3} eV/Å. 通过 Nosé-Hoover 恒温器^[29] 进行步长为 5 fs 的从头算分子动力学 (*ab initio* molecular dynamics, AIMD) 模拟. 声子谱通过 Phonopy 软件包结合密度泛函微扰理论 (density-functional perturbation theory, DFPT) 方法计算获得^[30]. 针对磁基态计算所采用的超晶胞模型, K 点网格设置为 $4 \times 6 \times 1$. 居里温度 (Curie temperature, T_C) 采用基于蒙特卡罗 (Monte Carlo, MC) 模拟的 Mcsolver 软件包^[31], 并结合 Wolff 算法进行计算. 拓扑边缘态、反常霍尔电导及反常能斯特系数的计算则通过 Wannier90 和 WannierTools 软件包来完成^[32,33].

3 结果与讨论

3.1 晶体结构与稳定性

LiMgP 晶体为反萤石结构^[34], 空间群为 216 号的 $F43m$, 可通过高温固相反应法制备, 晶格常数 $a = b = c = 6.005$ Å. 本文计算所采用的二维 LiMgP 结构是将优化后的三维 LiMgP 晶体沿着 (1 1 1) 晶面进行切面^[35], 然后沿着 a 和 b 基矢方向进行扩胞并结构优化, 用 Ti 原子替换超胞中的 Mg 原子得到, 如图 1(a) 所示为替换掺杂后二维单层 $\text{Li}_{12}\text{Mg}_{10}\text{Ti}_2\text{P}_{12}$ 的最优晶体结构, 结构优化后得到的晶格常数为 14.24 Å. 图 1(b) 是其对应的布里渊区示意图, 为了评估二维单层 $\text{Li}_{12}\text{Mg}_{10}\text{Ti}_2\text{P}_{12}$ 的晶体稳定性, 本文计算了结合能和形成能^[36,37]:

$$E_b = (12E_{\text{Li}} + 10E_{\text{Mg}} + 2E_{\text{Ti}} + 12E_{\text{P}} - E_{\text{Total}}) / 36, \quad (1)$$

$$E_f = (E_{\text{Total}} - 12\mu_{\text{Li}} - 10\mu_{\text{Mg}} - 2\mu_{\text{Ti}} - 12\mu_{\text{P}}) / 36, \quad (2)$$

其中, E_{Li} , E_{Mg} , E_{Ti} , E_{P} 和 E_{Total} 分别为单个 Li, Mg, Ti, P 原子和二维单层 $\text{Li}_{12}\text{Mg}_{10}\text{Ti}_2\text{P}_{12}$ 的总能量. μ_{Li} , μ_{Mg} , μ_{Ti} 和 μ_{P} 分别为单个 Li, Mg, Ti 和 P 原子的化学势. 计算得到体系的结合能和形成能分别为 2.77 eV 和 -0.34 eV, 这表明二维单层 $\text{Li}_{12}\text{Mg}_{10}\text{Ti}_2\text{P}_{12}$ 具有较好的键合能力以及在实验上制备的可能.

为了进一步验证二维单层 $\text{Li}_{12}\text{Mg}_{10}\text{Ti}_2\text{P}_{12}$ 的动力学和热力学稳定性, 本文也计算了体系的声子谱和室温下的分子动力学模拟. 如图 1(c) 所示, $\text{Li}_{12}\text{Mg}_{10}\text{Ti}_2\text{P}_{12}$ 在整个布里渊区中几乎不存在虚频, 证实了其动力学稳定性. 300 K, 350 K 和 400 K 下的分子动力学模拟如图 1(d) 所示, 势能都在较

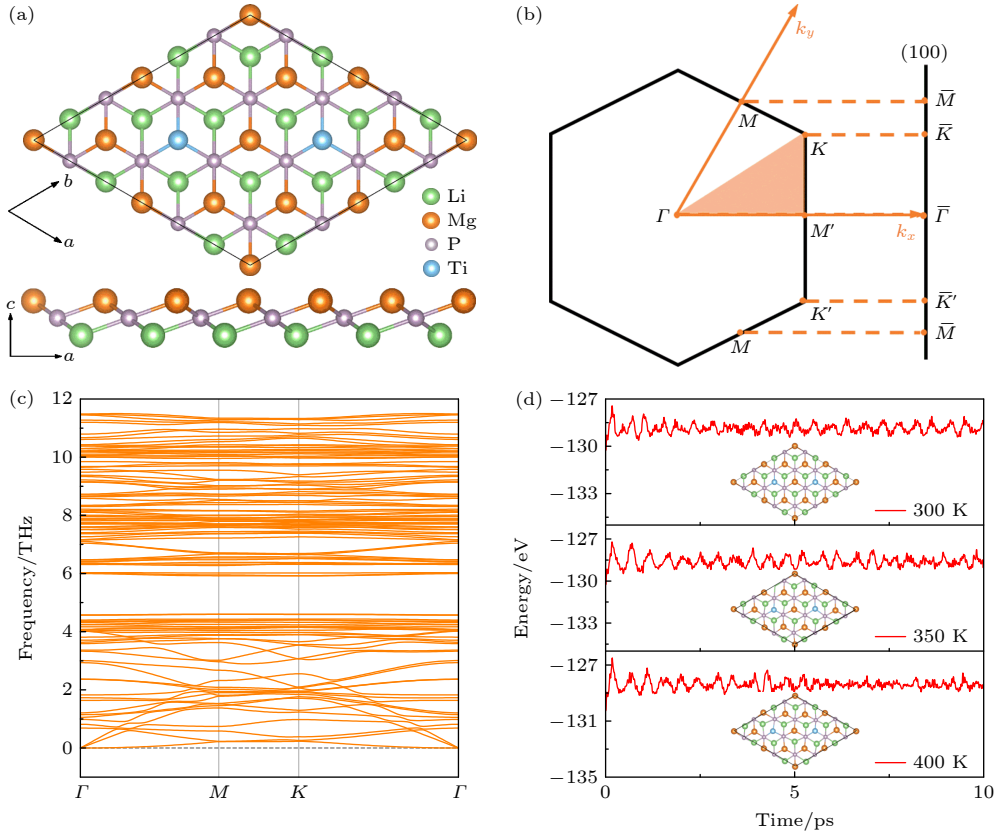


图 1 单层 $\text{Li}_{12}\text{Mg}_{10}\text{Ti}_2\text{P}_{12}$ 的 (a) 晶体结构, (b) 布里渊区, (c) 声子谱, (d) 不同温度下的分子动力学模拟

Fig. 1. (a) Schematic diagram of the crystal structure, (b) Brillouin zone, (c) phonon spectrum, and (d) molecular dynamics simulation at different temperatures of $\text{Li}_{12}\text{Mg}_{10}\text{Ti}_2\text{P}_{12}$ monolayer.

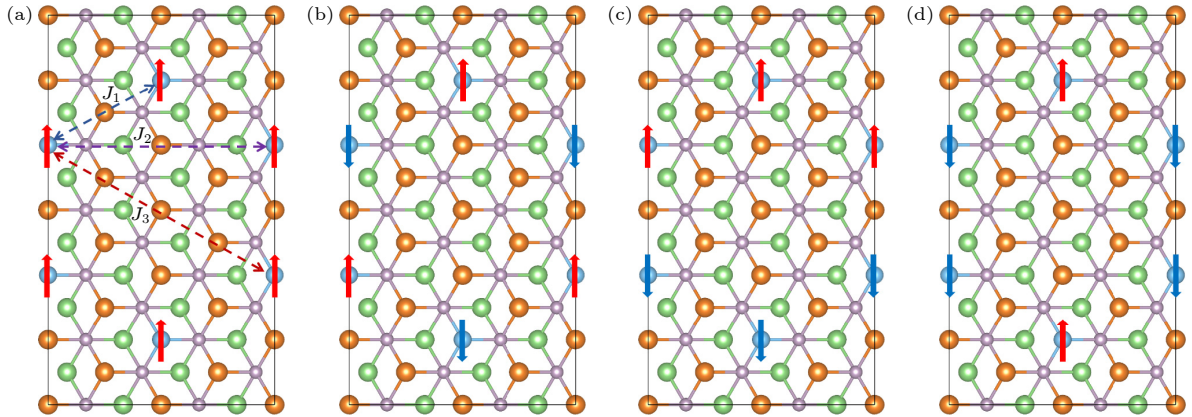


图 2 单层 $\text{Li}_{12}\text{Mg}_{10}\text{Ti}_2\text{P}_{12}$ 四种可能的磁构型 (a) FM; (b) AFM-1; (c) AFM-2; (d) AFM-3

Fig. 2. Four possible magnetic configurations of $\text{Li}_{12}\text{Mg}_{10}\text{Ti}_2\text{P}_{12}$ monolayer: (a) FM; (b) AFM-1; (c) AFM-2; (d) AFM-3.

小的能量范围内波动, 10 ps 内未发生严重的结构损坏, 表明二维单层 $\text{Li}_{12}\text{Mg}_{10}\text{Ti}_2\text{P}_{12}$ 具有优异的热力学稳定性.

3.2 磁基态与居里温度

为了确定二维单层 $\text{Li}_{12}\text{Mg}_{10}\text{Ti}_2\text{P}_{12}$ 的磁基态, 本文构建了 4 种可能的磁构型: 一种铁磁构

型 (ferromagnetic, FM) 和 3 种反铁磁构型 (antiferromagnetic, AFM), 如图 2 所示. 通过对比 4 种磁构型的总能量 (见表 1) 发现, 铁磁构型的能量最低, 表明该掺杂体系的磁基态为铁磁态.

通过基于经典自旋哈密顿量的蒙特卡罗模拟方法计算了体系的居里温度. 考虑到二维铁磁材料的磁晶各向异性较弱, 伊辛模型 (Ising model) 通

表 1 单层 $\text{Li}_{12}\text{Mg}_{10}\text{Ti}_2\text{P}_{12}$ 的磁构型能量和磁交换耦合常数Table 1. Magnetic configuration energy and magnetic exchange coupling constant of $\text{Li}_{12}\text{Mg}_{10}\text{Ti}_2\text{P}_{12}$ monolayer.

2D system	E_{FM}/eV	$E_{\text{AFM-1}}/\text{eV}$	$E_{\text{AFM-2}}/\text{eV}$	$E_{\text{AFM-3}}/\text{eV}$	J_1/meV	J_2/meV	J_3/meV
$\text{Li}_{12}\text{Mg}_{10}\text{Ti}_2\text{P}_{12}$	-260.92	-260.87	-260.67	-260.81	4.83	-0.69	0.51

常会高估居里温度的大小, 因此选用更适合二维体系的海森伯模型 (Heisenberg model) 对二维单层 $\text{Li}_{12}\text{Mg}_{10}\text{Ti}_2\text{P}_{12}$ 的居里温度进行模拟计算. 基于海森伯模型的哈密顿量公式如下 [38]:

$$H = - \sum_{ij} (J_{ij} S_i S_j). \quad (3)$$

在该模型中, $i(j)$ 表示 Ti 原子的位置, 其自旋磁矩用 S 表示. 考虑到 Ti 原子的未配对电子数为 2, 所以在模拟计算中, S 的取值为 2. 磁交换耦合常数记为 J . 在二维单层 $\text{Li}_{12}\text{Mg}_{10}\text{Ti}_2\text{P}_{12}$ 中, 本文仅考虑对第 1 近邻、第 2 近邻及第 3 近邻位置上两个 Ti 原子之间的磁交换作用, 相应的耦合常数分别记为 J_1 , J_2 和 J_3 , 具体标识如图 2 所示. 这些耦合常数的数值可以通过求解 4 种不同磁构型对应的能量所构成的方程组获得, 具体表达式如下:

$$E_{\text{FM}} = E_0 - (6J_1 + 12J_2 + 6J_3) |S|^2, \quad (4)$$

$$E_{\text{AFM-1}} = E_0 - (-6J_1 + 12J_2 - 6J_3) |S|^2, \quad (5)$$

$$E_{\text{AFM-2}} = E_0 - (2J_1 - 4J_2 - 6J_3) |S|^2, \quad (6)$$

$$E_{\text{AFM-3}} = E_0 - (-2J_1 - 4J_2 + 6J_3) |S|^2. \quad (7)$$

上述方程组中, E_0 代表与自旋自由度无关的基态能量, E_{FM} 和 E_{AFM} 分别为铁磁和反铁磁构型下体系的总能量. 从表 1 可以看出, 由于 Ti 原子与次近邻及第三近邻原子之间的距离超过 10 Å, 它们之间的磁交换作用极其微弱, 使得 J_2 和 J_3 较 J_1 约小 1 个数量级. 因此, 后续基于蒙特卡罗方法模拟居里温度时, 仅考虑了 J_1 的贡献. 同时, J_1 的符号为正, 意味着铁磁交换相互作用占主导地位, 从而驱动体系对外呈现出铁磁基态. 如图 3 所示, 单层 $\text{Li}_{12}\text{Mg}_{10}\text{Ti}_2\text{P}_{12}$ 的居里温度为 97 K, 高于近年来实验合成的典型二维材料 CrI_3 (45 K) [39] 和 CrGeTe_3 (30 K) [40] 的居里温度.

为了揭示该掺杂体系磁性的微观起源, 本文分析了原子轨道对总磁矩的贡献. 如图 4(a) 所示, Ti-3d 轨道的自旋向上通道在费米能级附近几乎被完全占据, 而自旋向下通道则几乎空置. 这种独特的电子构型决定了体系的自旋极化基态, 并构成了总磁矩的主要来源. 相比之下, 其他原子的自旋向上

和自旋向下态密度基本对称, 对总磁矩的贡献可以忽略不计. 为进一步阐明 Ti-3d 轨道的能级结构, 本文计算了其在费米能级附近的投影电子能带 (图 4(b)), 并结合晶体场理论进行了分析 (图 4(c)). 当 Ti 原子替换掺杂后, 每个 Ti 原子处于阴离子 P^{3-} 构成的晶体场中心, 并失去两个电子, 形成 Ti^{2+} , 电子组态为 $3d^2 4s^0$. 在类平面三角形晶体场的对称性下, 五重简并的 Ti-3d 轨道分裂为 3 个能级: 两个 e_g 轨道 ($d_{xy}, d_{x^2-y^2}$)、两个 e_g 轨道 (d_{xz}, d_{yz}) 和一个 a_g 轨道 (d_{z^2}). 根据泡利不相容原理和洪德规则, 两个 3d 电子优先以自旋平行的方式占据自旋向上通道的轨道. 同时, 本文也模拟了体系在高自旋态和低自旋态的能量差值, 结果为 -0.44 eV, 表明两个 3d 电子的排列方式为高自旋态. 如图 4(c) 所示, 该占据方式使得每个 Ti 原子贡献的原子磁矩理论上为 $2.0\mu_B$, 本文计算得到每个 Ti 原子的磁矩为 $1.8\mu_B$, 与理论分析吻合得良好, 微小的差异可归因于 Ti-3d 与配体 P^{3-} 之间的共价杂化导致的少量电子转移. 此外, 本文还计算了掺杂体系的自旋电荷密度, 如图 4(d) 所示, 自旋电荷主要局域在 Ti 原子周围, 进一步证明了体系的磁矩主要来源于替换掺杂的 Ti 原子.

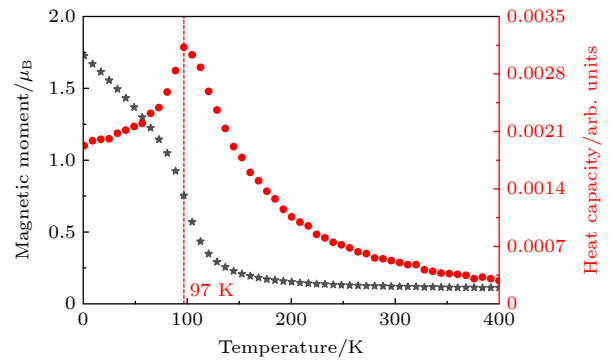


图 3 单层 $\text{Li}_{12}\text{Mg}_{10}\text{Ti}_2\text{P}_{12}$ 的磁矩 (黑色五角星) 和比热容 (红色圆点) 随温度变化的曲线

Fig. 3. Curves of magnetic moment (black pentagram) and specific heat capacity (red circle) as a function of temperature of $\text{Li}_{12}\text{Mg}_{10}\text{Ti}_2\text{P}_{12}$ monolayer.

3.3 拓扑态和输运性质

图 5(a) 是掺杂体系在费米能级附近的电子能带结构. 能带在自旋向上通道中于费米能级处相

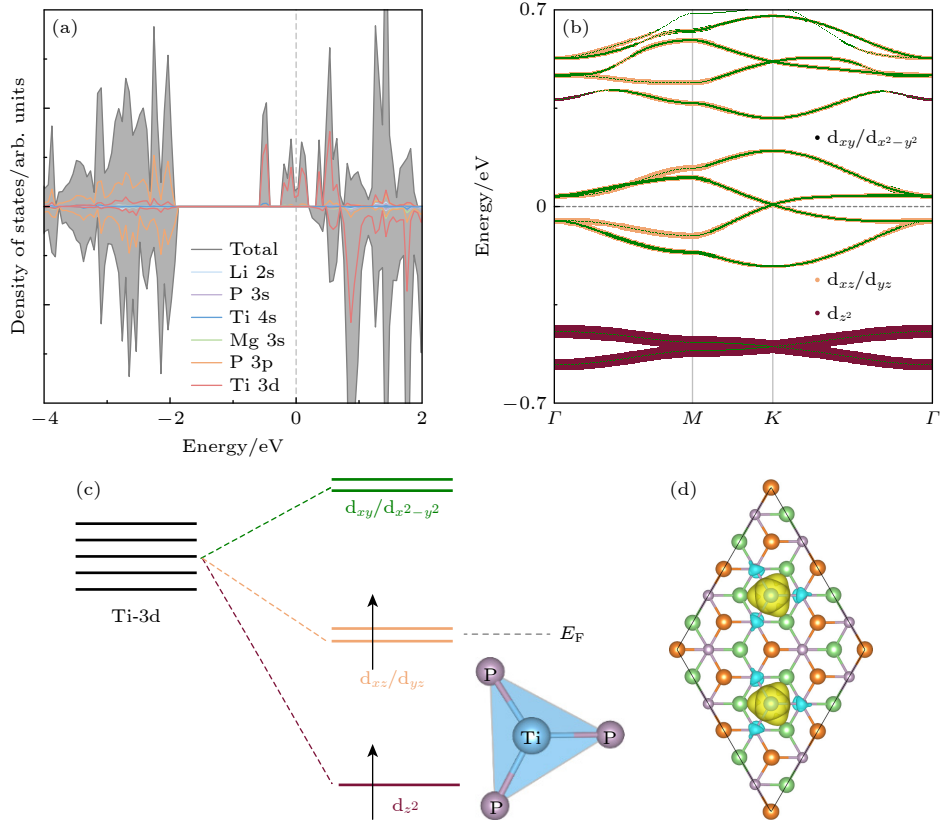


图 4 (a) 总态密度与分波态密度; (b), (c) Ti-3d 轨道的投影电子能带和电子占据示意图; (d) 自旋电荷密度, 等值面为 0.0015 eV/Bohr³

Fig. 4. (a) Total density of states and partial density of states; (b), (c) schematic diagram of projected electronic energy bands and electron occupancy of Ti-3d orbitals; (d) spin charge density with an isosurface value of 0.0015 eV/Bohr³.

交, 并在高对称性 K 点处形成一个理想的 Weyl 点, 如橙色箭头所示. 自旋向下通道则表现出 2.15 eV 的带隙. 因此, 能带表现出明显的自旋极化, 自旋极化率可通过以下公式计算^[36]:

$$P(\%) = \frac{N \uparrow(E_F) - N \downarrow(E_F)}{N \uparrow(E_F) + N \downarrow(E_F)}, \quad (8)$$

其中, $N \uparrow(E_F)$ 和 $N \downarrow(E_F)$ 分别是费米能级处的自旋向上和自旋向下的电子态密度. 由于 $N \downarrow(E_F) = 0$, 单层 $\text{Li}_{12}\text{Mg}_{10}\text{Ti}_2\text{P}_{12}$ 是一种在费米能级附近具有 100% 自旋极化的 Weyl 半金属. 此外, 本文还计算了沿 (1 0 0) 表面自旋向上通道在费米能级附近的边缘态. 如图 5(b) 所示, 投影 Weyl 点的位置由黑色箭头标出. 一条清晰的费米弧边缘态连接了高对称点 K 点和 K' 点处的两个投影 Weyl 点.

考虑自旋-轨道耦合作用后, 单层 $\text{Li}_{12}\text{Mg}_{10}\text{Ti}_2\text{P}_{12}$ 打开了 Weyl 点, 并形成了 3.2 meV 的带隙, 见图 5(c). 全局带隙的存在表明单层 $\text{Li}_{12}\text{Mg}_{10}\text{Ti}_2\text{P}_{12}$ 转变为了拓扑绝缘体. 图 5(d) 描绘了沿 (1 0 0) 表面在费米能级附近的边缘态, 其中价带和导带由一

条穿越带隙的手性边缘态连接. 为了确认这一非平凡的拓扑态, 我们使用 Wannier 函数构建哈密顿量的紧束缚模型, 并利用以下公式计算动量空间中的 Berry 曲率 $\Omega(k)$ ^[41]:

$$\Omega(k) = \sum_n f_n \Omega_n(k), \quad (9)$$

$$\Omega_n(k) = -2\text{Im} \sum_{m \neq n} \frac{\hbar^2 \langle \psi_{nk} | v_x | \psi_{mk} \rangle \langle \psi_{mk} | v_y | \psi_{nk} \rangle}{(E_m - E_n)^2}. \quad (10)$$

具体来讲, 求和部分涵盖所有的占据态 $|\psi_{nk}\rangle$, E_n 代表布洛赫波函数的本征值, f_n 是费米-狄拉克分布函数, v_x 和 v_y 表示速度算符. 如图 6(a) 所示, 不为零的贝里曲率分布在高对称性的 K 点和 K' 点, 均为正值且是量子化的. 此外, 陈数 (C) 可通过以下方程对第一布里渊区中的贝里曲率进行积分来获得:

$$C = \frac{1}{2\pi} \int_{BZ} d^2k \Omega(k), \quad (11)$$

其中, 打开能隙的每个 Weyl 点对 C 的贡献为 0.5.

因此, 二维单层 $\text{Li}_{12}\text{Mg}_{10}\text{Ti}_2\text{P}_{12}$ 的 C 值为 +1. 此外, 还计算了单层 $\text{Li}_{12}\text{Mg}_{10}\text{Ti}_2\text{P}_{12}$ 在打开的 Weyl 点附近的反常霍尔效应. 图 6(b) 所示的反常霍尔效应的平台特征清晰地展示了反常霍尔电导的量子化, 证明单层 $\text{Li}_{12}\text{Mg}_{10}\text{Ti}_2\text{P}_{12}$ 中出现了量子反常霍尔效应.

反常能斯特效应是一种横向热电现象, 在无外部磁场的情况下, 其会产生垂直于热流的横向电压, 从而直接促进热能到电能的转换. 反常能斯特效应与反常霍尔效应之间的一个关键区别在于它们的贝里曲率的贡献, 反常能斯特效应是由于费米能级附近的贝里曲率贡献而出现的, 而反常霍尔效

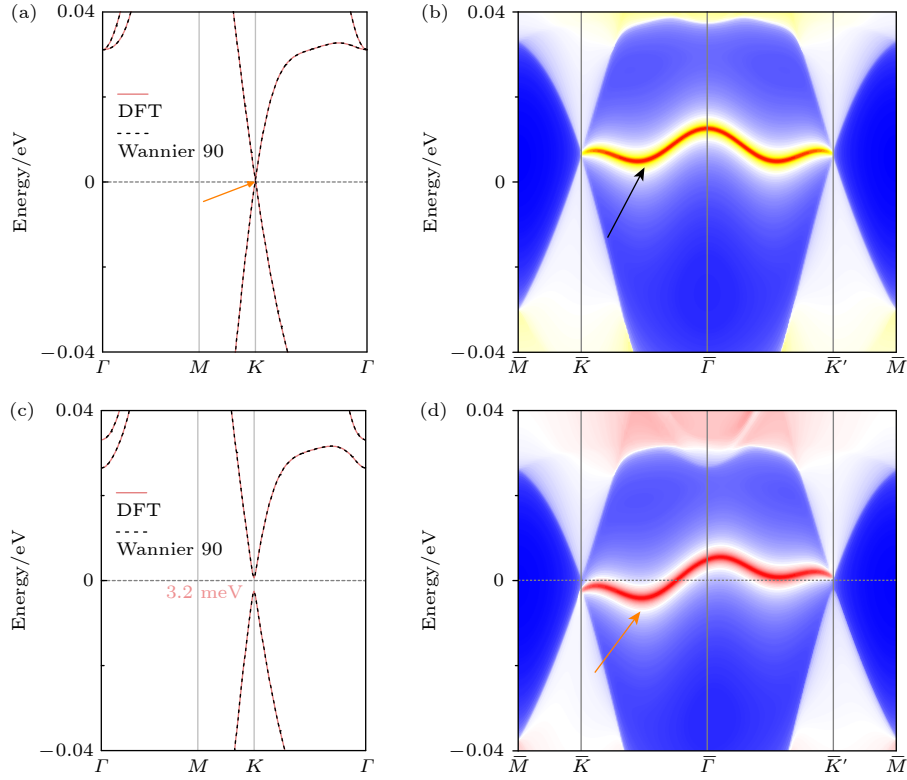


图 5 通过密度泛函理论 (实线) 和 Wannier 函数 (虚线) 计算的能带结构 (a) 不考虑自旋-轨道耦合效应; (b) 沿 (1 0 0) 方向的费米弧边缘态; (c) 考虑自旋-轨道耦合效应; (d) 沿 (1 0 0) 方向的手性边缘态

Fig. 5. Calculated band structures of the $\text{Li}_{12}\text{Mg}_{10}\text{Ti}_2\text{P}_{12}$ monolayer by DFT (solid line) and Wannier functions (dashed line): (a) Without spin-orbit coupling; (b) Fermi arc edge states along the (1 0 0) direction; (c) with spin-orbit coupling; (d) chiral edge states along the (1 0 0) direction.

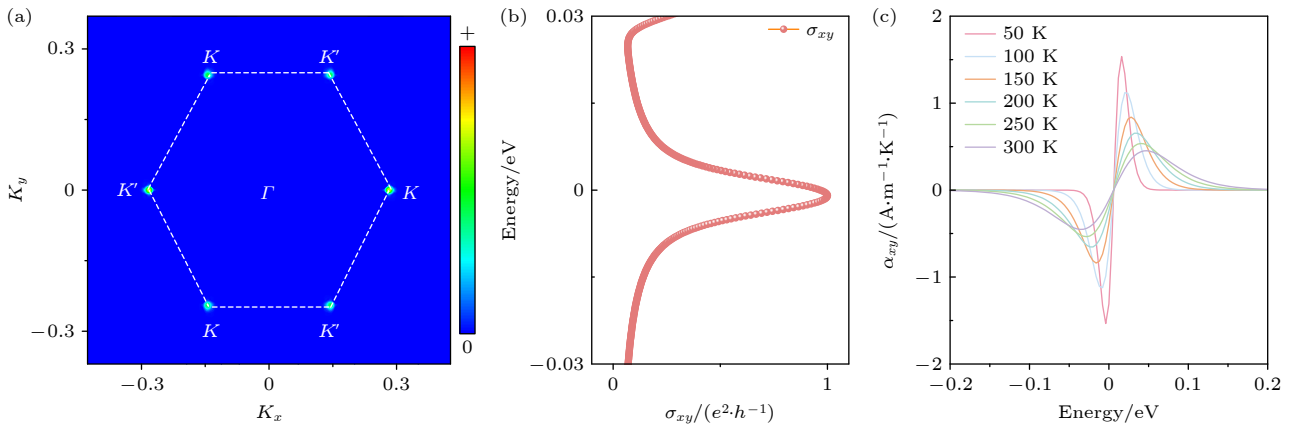


图 6 (a) 动量空间中二维贝里曲率在布里渊区的分布; (b) 反常霍尔电导率; (c) 不同温度下, 反常能斯特系数随化学势的变化关系

Fig. 6. (a) Distribution of two-dimensional Berry curvature in the Brillouin zone in momentum space; (b) anomalous Hall conductivity; (c) the relationship between anomalous Nernst coefficient and chemical potential at different temperatures.

应则源于所有占据能带上的贝里曲率在布里渊区积分的结果. 反常能斯特系数可以通过以下表达式从反常霍尔系数推导出来^[9]:

$$\alpha_{xy}^A = \frac{1}{e} \int d\varepsilon \frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \frac{(\varepsilon - \mu)}{T} \sigma_{xy}^A. \quad (12)$$

基于上述公式, 并使用 WannierTools 软件包进行处理, 得到了单层 $\text{Li}_{12}\text{Mg}_{10}\text{Ti}_2\text{P}_{12}$ 的反常能斯特系数在不同温度下随化学势的变化关系. 如图 6(c) 所示, 在温差为 50 K 下表现出明显不为零的反常能斯特系数, 且在不同温度下保持稳定. 其中在 50 K 时有最大的值 [~ 1.54 A/(m·K)], 显著高于 Fe_3O_4 [~ 0.03 A/(m·K)]^[42] 和 $\text{Nd}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ [~ 0.0045 A/(m·K)]^[43], 表明单层 $\text{Li}_{12}\text{Mg}_{10}\text{Ti}_2\text{P}_{12}$ 不仅在低功耗电子器件方面具有巨大潜力, 而且作为潜在的热电材料也具有广阔前景.

4 结 论

基于第一性原理计算, 系统分析了 Ti 掺杂单层 LiMgP 作为自旋-轨道耦合诱导的磁性拓扑绝缘体的电子结构和拓扑性质. 微观机制分析表明, Ti 原子以 Ti^{2+} 形式位于类平面三角形晶体场中心, 两个 3d 电子在洪德规则驱动下自旋平行占据自旋向上通道, 形成局域磁矩, 并通过铁磁交换相互作用建立长程铁磁序. 在不考虑自旋-轨道耦合时, 单层 $\text{Li}_{12}\text{Mg}_{10}\text{Ti}_2\text{P}_{12}$ 呈现 100% 自旋极化的铁磁 Weyl 半金属态; 而自旋-轨道耦合的引入在 Weyl 点处打开全局带隙, 驱动体系发生拓扑相变, 实现了陈数为 +1 的量子反常霍尔效应. 同时, 费米能级附近的贝里曲率分布驱动了显著的反常能斯特效应, 其反常能斯特系数可达到 1.54 A/(m·K). 研究表明, Ti 掺杂单层 LiMgP 将铁磁半金属性、拓扑非平庸能带结构及强贝里曲率响应集于一身, 为探索低功耗自旋电子学器件与高效热电转换材料提供了新的物理研究平台.

参考文献

- [1] Luo H X, Yu P F, Li G W, Yan K 2022 *Nat. Rev. Phys.* **4** 611
- [2] Xu S Y, Liu C, Kushwaha S K, et al. 2015 *Science* **347** 294
- [3] Hafezi M, Mittal S, Fan J, Migdall A, Taylor J M 2013 *Nat. Photonics* **7** 1001
- [4] Feng W, Hanke J P, Zhou X, Guo G Y, Blügel S, Mokrousov Y, Yao Y 2020 *Nat. Commun.* **11** 118
- [5] Weng H M, Yu R, Hu X, Dai X, Fang Z 2015 *Adv. Phys.* **64**

- 227
- [6] Mizuguchi M, Nakatsuji S 2019 *Sci. Technol. Adv. Mater.* **20** 262
- [7] He Q L, Hughes T L, Armitage N P, Tokura Y, Wang K L 2022 *Nat. Mater.* **21** 15
- [8] Tokura Y, Yasuda K, Tsukazaki A 2019 *Nat. Rev. Phys.* **1** 126
- [9] Xiao D, Yao Y G, Fang Z, Niu Q 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 026603
- [10] Kanagaraj M, Ning J, He L 2022 *Rev. Phys.* **8** 100072
- [11] Deng Y, Yu Y, Shi M Z, Guo Z, Xu Z, Wang J, Chen X H, Zhang Y 2020 *Science* **367** 895
- [12] Zou J Y, He Z R, Xu G 2019 *npj Comput. Mater.* **5** 96
- [13] Bernevig B A, Felser C, Beidenkopf H 2022 *Nature* **603** 41
- [14] Sattigeri R M, Pillai S B, Jha P K, Chakraborty B 2020 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **22** 4602
- [15] Lv L C, Zhao Y C, Ni J, Dai Z H 2025 *Phys. Rev. B* **112** 224304
- [16] Ouyang H, Dong Q X, Huang Y F, et al. 2021 *Chin. Phys. B* **30** 127101
- [17] Liu Q X, Liu Y Q, Xing J P, Jiang X, Zhao J J 2021 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **23** 18916
- [18] Yuan J H, Zhu Y L, Fang W Y, et al. 2023 *ACS Appl. Electron. Mater.* **5** 1405
- [19] Sattigeri R M, Jha P K, Śpiewak P, Kurzydłowski K J 2022 *Appl. Phys. Lett.* **121** 123101
- [20] Wang Z, Liu X L, Li Y X, et al. 2025 *Phys. Rev. Mater.* **9** 104202
- [21] Zhang W H, Ding S B, Zhang J, Cheng Z X, Wu Z M 2024 *Nanoscale* **16** 17110
- [22] Zhang D H, Zhou W Z, Li A L, Ouyang F P 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 096301 (in Chinese) [张德贺, 周文哲, 李奥林, 欧阳方平 2021 物理学报 **70** 096301]
- [23] Ye J F, Qin M Z, Xiao Q Q, Wang A S, He A N, Xie Q 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 227301 (in Chinese) [叶建峰, 秦铭哲, 肖清泉, 王傲霜, 何安娜, 谢泉 2021 物理学报 **70** 227301]
- [24] Kohn W, Becke A D, Parr R G 1996 *J. Chem. Phys.* **100** 12974
- [25] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11169
- [26] Kresse G, Joubert D 1999 *Phys. Rev. B* **59** 1758
- [27] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [28] Perdew J P, Chevary J A, Vosko S H, Jackson K A, Pederson M R, Singh D J, Fiolhais C 1992 *Phys. Rev. B* **46** 6671
- [29] Martyna G J, Klein M L, Tuckerman M 1992 *J. Chem. Phys.* **97** 2635
- [30] Baroni S, de Gironcoli S, Dal Corso A, Giannozzi P 2001 *Rev. Mod. Phys.* **73** 515
- [31] Evans R F L, Fan W J, Chureemart P, Ostler T A, Ellis M O A, Chantrell R W 2014 *J. Phys.: Condens. Matter* **26** 103202
- [32] Wu Q, Zhang S, Song H F, Troyer M, Soluyanov A A 2018 *Comput. Phys. Commun.* **224** 405
- [33] Mostofi A A, Yates J R, Lee Y S, Souza I, Vanderbilt D, Marzari N 2008 *Comput. Phys. Commun.* **178** 685
- [34] Kuriyama K, Kushida K, Taguchi R 1998 *Solid State Commun.* **108** 429
- [35] Zhang Z L, Zhang F, Wang K L, Li C, Wang J T 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 023102 (in Chinese) [张竺立, 张凡, 王凯雷, 李超, 王锦涛 2025 物理学报 **74** 023102]
- [36] Sun H T, Yin C H, Zhao Z H, Gao J N, Wang X 2024 *AIP Adv.* **14** 085323
- [37] Duan Y Y, Xu X K, Mao Y Q, et al. 2024 *Appl. Phys. Lett.* **125** 033101

- [38] Rezaei N, Alaei M, Akbarzadeh H 2022 *Comput. Mater. Sci.* **202** 110947
 [39] Huang B, Clark G, Navarro-Moratalla E, et al. 2017 *Nature* **546** 270
 [40] Gong C, Li L, Li Z L, et al. 2017 *Nature* **546** 265
 [41] Thouless D J, Kohmoto M, Nightingale M P, den Nijs M 1982 *Phys. Rev. Lett.* **49** 405
 [42] Ramos R, Aguirre M H, Anadón A, et al. 2014 *Phys. Rev. B* **90** 054422
 [43] Hanasaki N, Sano K, Onose Y, et al. 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 106601

Tuning the magnetoelectric and topological properties of Ti-doped LiMgP monolayer*

LIU Xianglin ZHANG Jie DING Shoubing[†] WU Zhimin[‡]

(College of Physics and Optoelectronic Engineering, Chongqing Normal University, Chongqing 401331, China)

(Received 31 March 2026; revised manuscript received 3 May 2026)

Abstract

Magnetic topological materials, which combine non-trivial band topology with intrinsic magnetism, have emerged as a promising platform for low-power spintronics. In this work, we systematically investigate the structural stability, magnetic ground state, electronic structure, and topological properties of a Ti-doped LiMgP monolayer by using first-principles calculations within the density functional theory (DFT) framework. The calculated binding energy (E_b) and formation energy (E_f) indicate excellent structural stability and suggest the experimental feasibility of synthesizing this material. Phonon dispersion and ab initio molecular dynamics (AIMD) simulations at different temperatures further demonstrate the outstanding dynamical and thermodynamic stability of the system. A thorough analysis of the magnetic mechanism reveals that the Ti atoms exist in the form of a Ti^{2+} valence state at the center of a planar triangle crystal field generated by the surrounding P^{3-} ligands. Driven by Hund's rule, the two 3d electrons occupy parallel spin states in the spin-up channel, giving rise to local magnetic moments that align ferromagnetically through exchange interactions. Monte Carlo (MC) simulations based on the extracted Heisenberg exchange parameters yield a ferromagnetic ground state with a Curie temperature (T_C) of 97 K. In the absence of spin-orbit coupling (SOC), the monolayer behaves as a fully spin-polarized (100%) ferromagnetic Weyl semimetal. Upon including SOC, a global band gap opens, gapping out the Weyl points, driving a topological phase transition to a magnetic topological insulator and giving rise to the quantum anomalous Hall effect (QAHE) with a Chern number of $C = +1$. Furthermore, the pronounced Berry curvature near the Fermi level (E_F) produces a significant anomalous Nernst effect (ANE), with the anomalous Nernst coefficient reaching up to 1.54 A/(m·K), which substantially exceeds that of conventional thermoelectric materials. These findings establish the Ti-doped LiMgP monolayer as an SOC-driven magnetic topological material that uniquely integrates ferromagnetic half-metallicity, topologically non-trivial band structure, and large Berry curvature responses, positioning it as an ideal platform for exploring both low-power spintronic devices and efficient transverse thermoelectric conversion.

Keywords: first principles calculation, Ti doped LiMgP, quantum anomalous Hall effect, anomalous Nernst effect

DOI: 10.7498/aps.75.20260444

CSTR: 32037.14.aps.75.20260444

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 62474027), the Natural Science Foundation of Chongqing, China (Grant Nos. CSTB2024NSCQ-MSX0891, CSTB2025NSCQ-GPX0252), and the Science and Technology Research Program of Chongqing Municipal Education Commission of China (Grant No. KJZD-K202300512).

[†] Corresponding author. E-mail: shoubingding@cqu.edu.cn

[‡] Corresponding author. E-mail: znwu@cqu.edu.cn

Ti掺杂单层LiMgP的磁电和拓扑性质调控

刘祥林 张洁 丁守兵 毋志民

Tuning the magnetoelectric and topological properties of Ti-doped LiMgP monolayer

LIU Xianglin ZHANG Jie DING Shoubing WU Zhimin

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 190705 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20260444

CSTR: 32037.14.aps.75.20260444

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20260444>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

Fe掺杂对二维CuI电子结构及光学性质的影响

Effect of Fe doping on electronic structure and optical properties of two-dimensional CuI

物理学报. 2025, 74(2): 023102 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241325>

Pt/La_{0.67}Sr_{0.33}MnO₃异质结中的反常霍尔效应

Anomalous Hall effect in Pt/La_{0.67}Sr_{0.33}MnO₃ heterojunctions

物理学报. 2023, 72(9): 097503 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221852>

磁性拓扑绝缘体中的量子输运现象

Quantum transport phenomena in magnetic topological insulators

物理学报. 2023, 72(17): 177301 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230690>

Er³⁺掺杂TiO₂的局域结构及电子性质的第一性原理研究

First-principles calculations of local structure and electronic properties of Er³⁺-doped TiO₂

物理学报. 2022, 71(24): 246102 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221847>

M(Mn, Ti, Mo)掺杂 α -Fe稳定性、电子结构和力学性能的第一性原理计算

First-principles study of stabilities, electronic structures, and mechanical properties of M(Mn, Ti, Mo)-doped α -Fe

物理学报. 2025, 74(24): 246202 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20251044>

Fe掺杂对Ni-Mn-Ti全d族Heusler合金马氏体相变和磁性能影响的研究

Effects of Fe doping on Martensitic Transformation and magnetic properties of Ni-Mn-Ti All-d-metal Heusler Alloy

物理学报. 2023, 72(4): 046301 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20222037>