

具有大磁晶各向异性性能的单层BaPb的室温量子反常霍尔效应

张蔚曦 李勇 田昌海 余彦超

Room-temperature quantum anomalous Hall effect in monolayer BaPb with large magnetocrystalline anisotropy energies

Zhang Wei-Xi Li Yong Tian Chang-Hai She Yan-Chao

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 157502 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20210014

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210014>

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

多狄拉克锥的二维CrPSe₃的半金属铁磁性与电子结构 (已撤稿)

Half-metallic magnetism and electronic structures of CrPSe₃ monolayers with multiple Dirac cones (withdraw)

物理学报. 2020, 69(24): 247101 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200960>

铁磁/非磁金属异质结中的拓扑霍尔效应

Topological Hall effect in ferromagnetic/non-ferromagnetic metals heterojunctions

物理学报. 2018, 67(13): 131202 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180369>

第一性原理研究half-Heusler合金VLiBi和CrLiBi的半金属铁磁性

First-principles study on half-metallic ferromagnetism of half-Heusler alloys VLiBi and CrLiBi

物理学报. 2018, 67(21): 217501 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181129>

手征马约拉纳费米子

Chiral Majorana fermion

物理学报. 2020, 69(11): 117302 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200534>

氧空位缺陷对PbTiO₃铁电薄膜漏电流的调控

Effect of oxygen vacancy defect on leakage current of PbTiO₃ ferroelectric thin film

物理学报. 2018, 67(18): 187701 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181130>

Al和O间隙原子对-Al₂O₃热力学性质影响的第一性原理计算

Effects of the doping of Al and O interstitial atoms on thermodynamic properties of -Al₂O₃:first-principles calculations

物理学报. 2017, 66(1): 016103 <https://doi.org/10.7498/aps.66.016103>

具有大磁晶各向异性性能的单层 BaPb 的 室温量子反常霍尔效应*

张蔚曦 李勇 田昌海 余彦超†

(铜仁学院物理与电子工程系, 铜仁 554300)

(2021 年 1 月 4 日收到; 2021 年 3 月 17 日收到修改稿)

具有巨大应用潜力的二维材料在纳米技术领域引起了人们极大的研究兴趣. 基于第一性原理计算, 本文预测了二维六角晶格 BaPb 体系具有室温量子反常霍尔效应. 体系磁基态是铁磁半金属态, 并且自旋极化的 Pb-p 轨道导致体系的时间反演对称性破缺. 具有非零 Chern 数 ($C = 1$) 的单层 BaPb 中非平庸拓扑性来源于全自旋极化的 $p_{x,y}$ 轨道形成的二次型非狄拉克能带. 不同于之前报道的 p_z 轨道形成的狄拉克拓扑态很容易被衬底破坏, $p_{x,y}$ 轨道形成的 σ 键非常稳定. 当考虑自旋-轨道耦合作用时, 二次型的非狄拉克点打开了接近 177.39 meV 的非平庸带隙. 通过反常霍尔电导、陈数、贝里曲率和边缘态的计算, 证实了 BaPb 非平庸的拓扑性. 此外, 体系还表现出每个单元 52.01 meV 的大磁晶各向异性性能.

关键词: 量子反常霍尔效应, 二次型非狄拉克能带, 铁磁半金属态, 第一性原理

PACS: 75.70.AK, 73.22.-f, 73.43.-f

DOI: 10.7498/aps.70.20210014

1 引言

在过去的十几年里, 二维材料由于其独特的物理化学性质, 在许多领域均有着广泛的应用, 例如纳米电子和光器件、能量存储、催化和化学传感器等^[1–6]. Haldane^[7] 基于二维蜂窝状晶格提出了量子反常霍尔效应 (quantum anomalous Hall effect, QAHE). 这一理论预测激发了研究者们对非耗散电子器件应用的极大兴趣^[8–11]. 然而, 实现 QAHE 的难点在于既要满足时间反演对称性的破坏, 又要满足自旋-轨道耦合 (spin-orbit coupling, SOC)^[12–15]. 因此, 建立长程铁磁有序的体系成为最常规的设计思路. 目前, 该方法只能使 QAHE 在极低温条件下 (通常低于 100 mK) 观察到, 因为长程磁序会被磁畴破坏^[16–18]. 随后, V-I 或 Cr-V 共

掺杂和三掺杂的拓扑绝缘体系的掺杂方案被提出, 以提高 QAHE 观测温度, 但改善效果不明显^[19–22]. 极端温度条件严重限制了自旋电子器件的实际应用. 利用 QAHE 在室温下寻找一些非常规磁性材料是非常重要的^[23,24]. 幸运的是, 研究人员发现, 碱土金属体系作为一种独特的铁磁半金属, 可能为解决这一问题提供了一种潜在的方法. 这种材料的磁性来源于阴离子 p 轨道的自旋极化. 这与传统的磁性材料有很大的不同. 最近发现的二维铁磁绝缘体也提供了前所未有的机会来创造能谷劈裂, 从而在高温下更薄的体系中实现 QAHE^[25–27].

本文基于密度泛函理论 (density functional theory, DFT) 预测室温量子反常霍尔效应可以在单层 BaPb 材料中实现. 这种新型铁磁半金属材料的非平庸拓扑性来自于全自旋极化的二次非狄拉克带. 由于单层 BaPb 材料的 C_{3v} 对称性, 因此由

* 国家自然科学基金 (批准号: 12064038)、贵州省科研项目 (批准号: KY[2019]179, KY[2017]315, ZK[2021] 一般-034)、贵州省优秀青年科技人才项目 (批准号: [2019]5673) 和铜仁市科技局科学技术基金 (批准号 [2020]77) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: ycshe@xtu.edu.cn

$p_{x,y}$ 轨道组成的位于 Γ 点的非线性能带, 这与此前报道的 p_z 轨道形成的线性狄拉克态不同, 即使与衬底杂化, 它仍能保持原有的拓扑性质. 计算得到的声子谱在整个布里渊区内没有虚频, 说明单分子层 BaPb 体系是动力学稳定的. 通过蒙特卡罗模拟, 确定了单层 BaPb 的居里温度可达 378 K. 通过定义式 $\Delta E = E_{100} - E_{001}$, 考虑了两种磁化方向: 平面内的 [100] 方向和垂直于平面的 [001] 方向, 计算了 BaPb 晶胞的磁晶各向异性 (magnetic anisotropy energy, MAE). 令人惊讶的是, 考虑 SOC 效应, 单分子层 BaPb 的 MAE 高达 52.01 meV/cell. 同时, 二次型的非狄拉克点打开 177.39 meV 的带隙. 贝利曲率和边缘态的计算进一步证明了单层 BaPb 系统可以实现量子反常霍尔态. 这一发现表明单层 BaPb 材料可以作为 QAHE 材料的候选材料, 从而促进了自旋电子学的发展.

2 计算方法

为了系统地研究单层 BaPb 的磁性、电子性质和拓扑性质, 采用了基于 DFT 的 VASP 软件包 (the Vienna *ab initio* simulation package)^[28,29]. 选取了广义梯度近似的 Perdew-Burke-Ernzerh (PBE) 势作为交换关联势. 计算中使用了投影缀加平面波 (projected augmented wave, PAW) 方法处理电子与原子核之间的相互作用. 在结构优化中, 为了找到最稳定的结构, 离子弛豫的收敛标准设置为 10^{-6} eV, 平面波截断能采用了 500 eV, 并使用了 Γ -centered 方法产生 K 点, K 点网格为 $12 \times 12 \times 1$. 此外, 为了防止薄膜与重复单元薄膜直接的相互作用, 在垂直于平面向外的 z 方向, 设置了 20 Å 的真空层. 本文使用 PHONOPY 软件包的有限位移法来计算声子谱, 以保证结构的稳定性^[30]. 利用半无限边界条件下格林函数的方法和 Wannier Tools 软件包对单层 BaPb 的边缘态、贝利曲率和反常霍尔电导进行了计算^[31]. 对于贝利曲率积分, 采用了 K 点网格为 $120 \times 120 \times 1$ ^[32,33].

3 结果与讨论

3.1 晶体结构与其稳定性

优化后的单层 BaPb 结构如图 1(a) 所示. 原胞包含一个 Ba 原子和一个 Pb 原子, 形成类似石

墨烯的平整的六角形蜂窝状结构. 其空间群为 $P\bar{6}m2$, 点群为 D_{3h} . 体系优化后晶格常数为 6.01 Å, Ba—Pb 键长为 3.47 Å. 本文从形成能和结构的动力学稳定性两个方面分析了单层 BaPb 的稳定性. 首先通过定义 $E_f = E_{2D}/N_{2D} - E_{3D}/N_{3D}$ 计算了形成能^[34]. 式中 E_{2D} (E_{3D}) 和 N_{2D} (N_{3D}) 分别是二维 (三维) 结构的总能和各自原胞内所包含的原子数. 计算得到该结构的形成能为 1.03 eV/atom, 大于众所周知的硅烯的 0.76 eV/atom^[35,36]. 从单分子层 BaPb 的声子谱可以推断其动力学稳定性. 随后采用 4×4 的超胞计算了其声子谱, 如图 1(b) 所示. 可以看到, 单层 BaPb 结构声子谱的所有振动模式在整个布里渊区均为正值, 不存在虚频, 表明其动力学是稳定的.

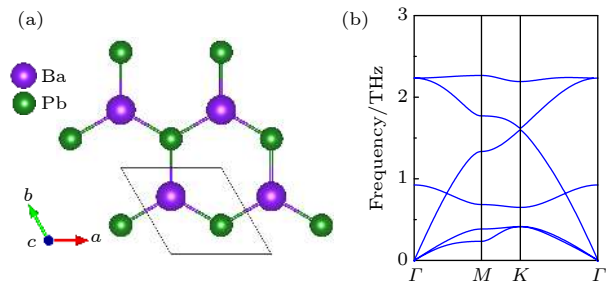


图 1 (a) 单层 BaPb 的晶格结构; (b) 单层 BaPb 声子谱. 计算中使用一个 4×4 的超胞

Fig. 1. (a) Lattice structure for monolayer BaPb; (b) the phonon dispersion curves monolayer BaPb. A 4×4 super-cell is used in the calculation.

3.2 磁性质与居里温度分析

通过 DFT 计算发现, 无自旋极化的单层 BaPb 的总能量远高于自旋极化的单层 BaPb. 这意味着尽管单分子层 BaPb 系统不包含磁性原子, 但它仍然具有磁性. 为了解系统的磁性来源, 如图 2(a) 和图 2(b) 所示, 计算了 2×2 超胞的三种磁构型: 铁磁 (ferromagnetic, FM) 态、反铁磁 (antiferromagnetic, AFM) 态和非铁磁 (non-magnetic, NM) 态的能量, 以确定单层 BaPb 的磁基态.

计算表明, 对于单层 BaPb 体系, FM 态能量比 NM 态和 AFM 态分别低 981.26 和 198.95 meV. 这表明, FM 态具有最低能量, 体系基态为铁磁态, 磁矩主要来源于 Pb 原子的 p 轨道上. 此外, 考虑了两种磁化方向: 平面内的 [100] 方向和垂直于平面的 [001] 方向计算了 BaPb 原胞的 MAE. MAE 定义为 $\Delta E = E_{100} - E_{001}$, 其中 E_{100} 和 E_{001} 分别表

示磁化沿 [100] 和 [001] 方向的体系的总能. MAE 为正值说明易磁化方向沿着 z 轴方向, 反之则是沿着 x 轴方向. 计算结果约为 52.01 meV, 表明磁矩沿着 [001] 轴时能量最低. 因此, 将重点研究 BaPb 单层磁化沿 z 轴的拓扑性质.

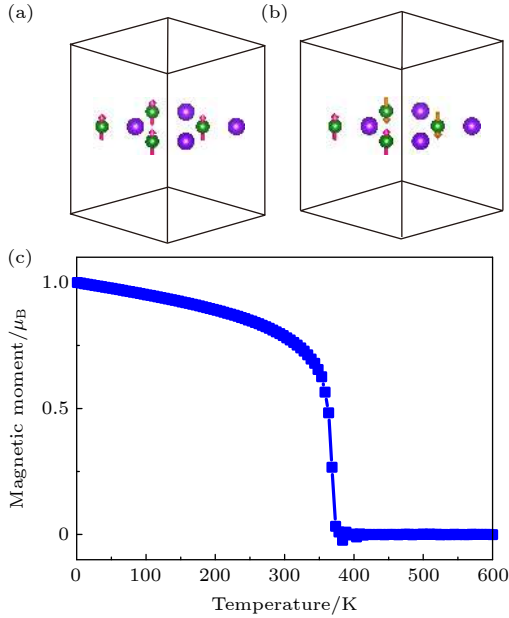


图 2 单分子层 BaPb 的铁磁构型 (a) 和反铁磁构型 (b); (c) 利用蒙特卡罗模拟得到的单层 BaPb 的磁矩与温度的关系

Fig. 2. Two magnetic configurations for monolayer BaPb: (a) Ferromagnetic; (b) antiferromagnetic. (c) The average magnetic moment per unit cell with respect to temperature calculated for monolayer BaPb obtained by using Monte Carlo simulations.

体系的铁磁居里温度对于 QAHE 的实验观测极为重要. 因此, 还利用蒙特卡罗 (Monte Carlo, MC) 模拟, 估计了 BaPb 单层的居里温度 (T_c)^[35]. 本文用海森伯模型来描述自旋哈密顿量, 即 $H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - K \sum_i (S_i^z)^2$. 第一项和第二项分别表示到最近邻的短程交换作用 (J) 和体系的 MAE (K). 通过 DFT 计算可以得出交换作用参数 J 值为 16.58 meV. 在这里, 本文的 MC 模拟是考虑周期边界条件在一个 100×100 的超胞上进行的, 从而得出单层 BaPb 的居里温度为 378 K, 如图 2(c) 所示.

3.3 电子结构

单层 BaPb 最有趣的性质仍然反映在其电子结构上. 首先研究不考虑 SOC 作用的单层 BaPb

的能带结构. 如图 3 所示, 单分子层 BaPb 的能带结构是完全自旋极化的, 即, 自旋向上的能带展现出绝缘性, 而自旋向下的能带展现出金属性. 同时, 可以清楚地观测到自旋向下的能带在费米能级附近的 Γ 点上存在二次型的非狄拉克能带.

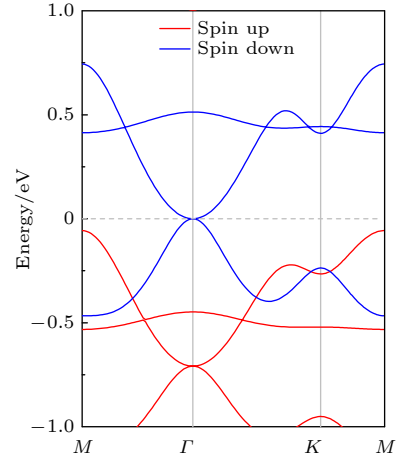


图 3 单分子层 BaPb 的自旋极化能带结构

Fig. 3. Spin-polarized band structure for monolayer BaPb.

随后, 研究考虑 SOC 作用的磁矩分别沿 x 方向平面内和沿 z 方向平面外的单层 BaPb 的能带结构, 如图 4 所示. 结果表明, 磁矩沿 z 方向, 二次型的非狄拉克能带打开了全局域带隙 177.39 meV, 体系呈现出拓扑绝缘态, 而在平面内沿 x 方向有磁矩的带隙结构则显示出金属态. 这意味着通过施加电场或构造异质结改变磁化方向, 可以实现体系从金属态到拓扑绝缘态的相变.

3.4 量子反常霍尔效应

在这一部分, 通过计算贝利曲率和 Chern 数来研究单层 BaPb 的拓扑性质. 首先, 利用公式 $\sigma_{xy} = Ce^2/h$ 计算出反常霍尔电导, 如图 5(a) 所示. Chern 数 C ^[36] 可以通过对第一布里渊区的倒空间的贝利曲率积分 $C = \frac{1}{2\pi} \int_{BZ} d^2k \Omega(k)$ 得到, 其中

$$\Omega(\mathbf{k}) = - \sum_n f_n \sum_{n' \neq n} \frac{2\text{Im} \langle \psi_{n\mathbf{k}} | \nu_x | \psi_{n'\mathbf{k}} \rangle \langle \psi_{n\mathbf{k}} | \nu_y | \psi_{n'\mathbf{k}} \rangle}{(E_{n'} - E_n)^2}$$

为倒空间的贝利曲率; ν_x 和 ν_y 是电子沿 x, y 方向的速度算符. 比较有意思的是, 单层 BaPb 的反常霍尔电导曲线中可以观察到一个量子化的平台, 这是陈绝缘体的特征. 在图 5(a) 中的结果表明, 系统的 Chern 数为 1, 这意味着在导带和价带之

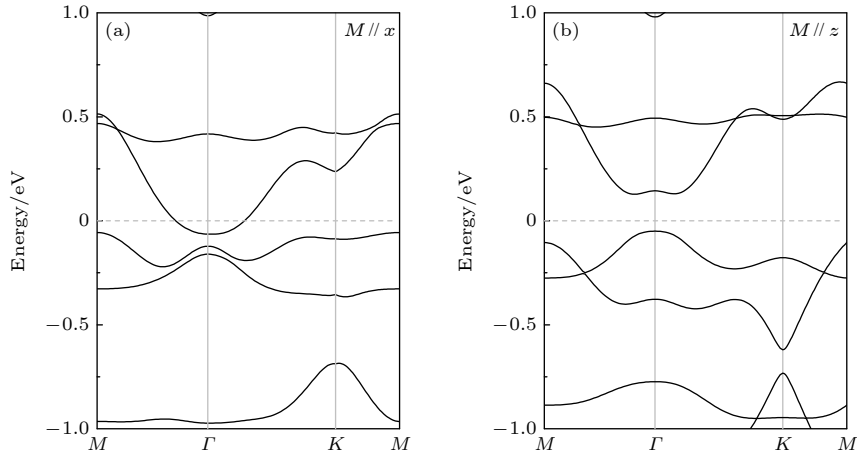

 图 4 考虑 SOC 时单层 BaPb 的能带结构 (a) 磁矩平面内沿 x 方向; (b) 磁矩平面外沿 z 方向

Fig. 4. Band structures (including SOC) for monolayer BaPb: (a) With magnetic moments oriented in-plane along x ; (b) with magnetic moments oriented out of the plane (along z directions).

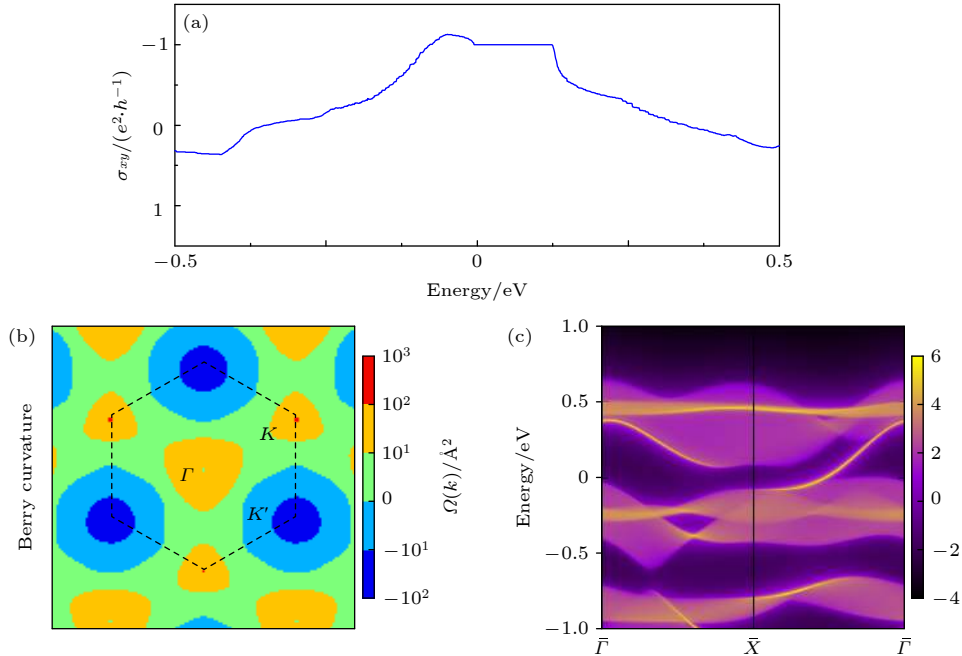


图 5 (a) 反常霍尔电导率随费米能级移动的变化; (b) 动量空间中带有 SOC 的 Berry 曲率; (c) 计算得到的单层 BaPb 半无限片的边缘状态

Fig. 5. (a) Anomalous Hall conductivity when the Fermi level is shifted around the original Fermi level; (b) the Berry curvature with SOC in the momentum space; (c) calculated edge state of a semi-infinite sheet for monolayer BaPb.

间只有一条边缘态连接. 同时, 量子反常霍尔态沿高对称路径分布的贝利曲率如图 5(b) 所示. 可以看到在倒空间中贝利曲率在 Γ 点附近表现出高对称性, 从另一个方面证明了系统可以实现 QAHE.

此外, Chern 绝缘体最显著的特征是在纳米带边界处存在手性边缘态. 换句话说, 非平庸量子反常霍尔态将确保量子化手性边缘态的存在. 因此, 本文基于最局域 Wannier 函数构造了 BaPb 半无

限纳米片的格林函数, 并计算了边缘处的局域态密度. 体系 Chern 数的绝对值等于其边缘态数目. 可以看到, 在费米能级附近的导带和价带之间存在一个拓扑保护的手性边缘态, 这与 Chern 数绝对值为 1 时的结果相一致, 如图 5(c) 所示. 此前计算出的在 Γ 点打开的局域间隙为 177.39 meV, 这意味着单层 BaPb 中实现的 QAHE 有望超过室温, 大大高于最近在掺杂 Cr 的 Bi_2Se_3 薄膜中观察到 QAHE 的 30 mK 的温度.

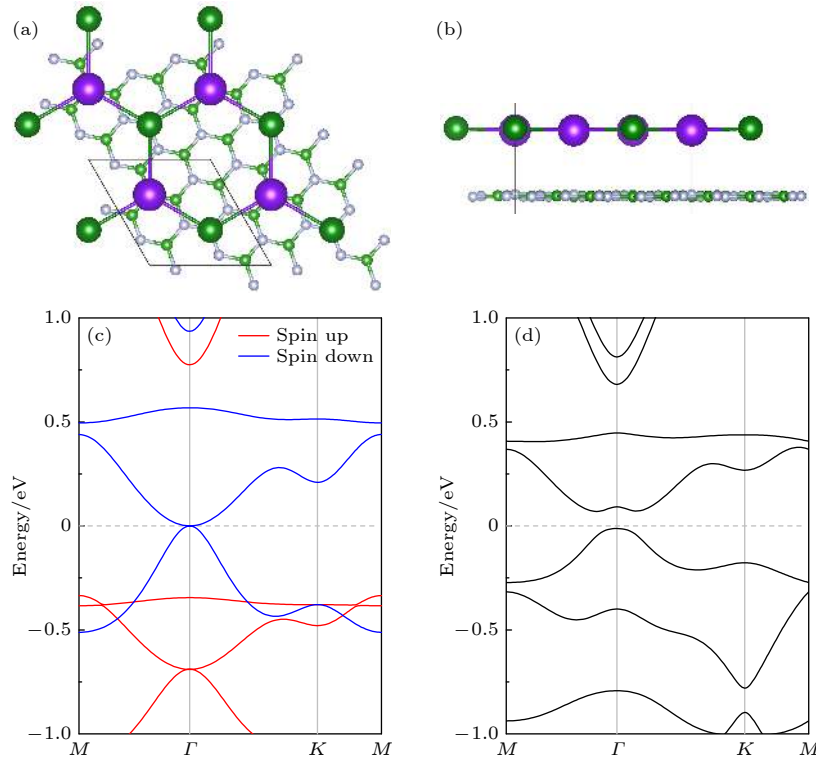


图 6 (a), (b) h-BN/BaPb 异质结 (h-BN/BaPb) 体系中单分子层 BaPb 的结构晶体结构的俯视图和侧视图; (c) h-BN/BaPb 异质结自旋极化能带结构; (d) 考虑 SOC 效应时 h-BN/BaPb 异质结体系中单分子层 BaPb 的带结构 (考虑 SOC 效应)

Fig. 6. Crystal structure of monolayer BaPb in the h-BN/BaPb heterostructure system: (a) Top and (b) side views. Here, the black solid lines denote the unit cell. (c) Spin-polarized band structure of h-BN/BaPb heterostructure; (d) the band structures (including SOC) of monolayer BaPb in the h-BN/BaPb heterostructure system.

3.5 基底效应

考虑到二维材料的电子能带结构和磁性质的稳定性对于量子器件的实验制备和发展非常重要 [37,38]. 本部分以六方氮化硼 (hexagonal boron nitride, h-BN) 为衬底研究了单层 BaPb 的能带结构. 在 h-BN 衬底上生长的单层 BaPb 可能的晶格结构的俯视图和侧视图如图 6(a) 和图 6(b) 所示. 定义晶格失配率为 $|a_{\text{h-BN}} - a_{\text{BaPb}}|/a_{\text{h-BN}}$, 其中 $a_{\text{h-BN}}$ 和 a_{BaPb} 分别为 h-BN 衬底和单层 BaPb 的晶格常数. 在本文的模型中, 使用了 1×1 的 BaPb 和 $\sqrt{7} \times \sqrt{7}$ 的 h-BN 衬底, 计算得到两者的晶格失配率非常小, 为 5.71%.

如图 6(c) 所示, 在 h-BN/BaPb 异质结构中, 费米能级附近的二次型非狄拉克带色散仍然存在. 考虑 SOC 效应时, 二次型非狄拉克能带打开了全局带隙 82.11 meV, 如图 6(d) 所示. 这些结果表明, h-BN 衬底对单分子层 BaPb 的能带结构几乎没有影响. 因此, 在狄拉克锥上观察到的 SOC 诱导的非平庸体带隙可能表明在该异质结构中可以实现量子反常霍尔绝缘态, 用于潜在的器件应用.

最后, 还用蒙特卡罗模拟了 h-BN/BaPb 异质结中磁矩与温度的关系, 如图 7 所示. 结果表明, 由于基底导致的近邻效应可能影响异质结中电子跃迁和磁交换机制, 所以交换作用参数 J 值变为 2.39 meV, 相应的 T_c 变为 54 K. 但由于非磁性的基底 h-BN 与 BaPb 是通过范德瓦耳斯作用结合的, 因此体系的磁各向异性几乎不变, 为 51.32 meV.

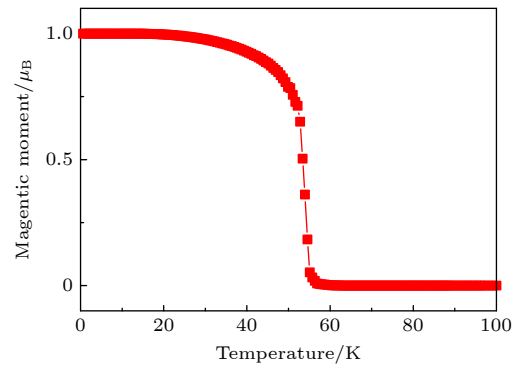


图 7 利用蒙特卡罗模拟得到的 h-BN/BaPb 异质结的磁矩与温度的关系

Fig. 7. Average magnetic moment per unit cell with respect to temperature calculated for the h-BN/BaPb heterojunction obtained by using Monte Carlo simulation.

4 结 论

本文利用第一性原理计算研究了单层 BaPb 作为新型 Chern 绝缘体候选的电子、磁性和拓扑性质. 声子谱计算验证了单层 BaPb 的动力学稳定性. 这种二维材料的负的形成能进一步证实了实验实现的可能性. 在估算居里温度为 378 K 左右的情况下, 它具有铁磁基态, 可在垂直于平面的坐标轴上得到巨大的 MAE, 磁矩沿 z 方向时, 体系呈现出拓扑绝缘态, 而沿 x 方向则显示出金属态. 这意味着通过施加电场或构造异质结改变磁化方向, 可实现体系从金属态到拓扑绝缘态的相变. 最有趣的是, 在一个非零的 Chern 数 ($C = 1$) 下, 二次型非狄拉克点通过 SOC 效应打开了 177.39 meV 的非平庸拓扑间隙. 这种既具有全自旋极化的能带结构, 又有超大带隙, 而且还能实现金属态到拓扑绝缘态的相变结果对于将来纳米自旋电子器件的应用是非常有利的.

参考文献

- [1] Lu J M, Zheliuk O, Leermakers I, Yuan N F Q, Zeitler U, Lwa K T, Ye J T 2015 *Science* **350** 1353
- [2] Gong C, Zhang X 2019 *Science* **363** eaav4450
- [3] Deng Y, Yu Y, Shi M Z, Guo Z, Xu Z, Wang J, Chen X H, Zhang Y 2020 *Science* **367** 895
- [4] Gao Y X, Zhang L Z, Zhang Y Y, Du S X 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 238101 (in Chinese) [高艺璇, 张礼智, 张余洋, 杜世萱 2018 *物理学报* **67** 238101]
- [5] Xu Y Q, Wang C 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 184216 (in Chinese) [徐依全, 王聪 2020 *物理学报* **69** 184216]
- [6] Sun Z H, Guan H M, Fu L, Shen B, Tang N 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 027302 (in Chinese) [孙真昊, 管鸿明, 付雷, 沈波, 唐宁 2021 *物理学报* **70** 027302]
- [7] Haldane F D M 1988 *Phys. Rev. Lett.* **61** 2015
- [8] Liu C X, Qi X L, Dai X, Fang Z, Zhang S C 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 146802
- [9] Zhang H, Lazo C, Blügel S, Heinze S, Mokrousov Y 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 056802
- [10] Hu J, Zhu Z, Wu R 2015 *Nano Lett.* **15** 2074
- [11] Li P, Li X, Zhao W, Chen H, Chen M X, Guo Z X, Feng J, Gong X G, MacDonald A H 2017 *Nano Lett.* **17** 6195
- [12] Li P 2019 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **21** 6712
- [13] Onoda M, Nagaosa N 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 206601
- [14] Hasan M Z, Kane C L 2010 *Rev. Mod. Phys.* **82** 3045
- [15] Luo W, Xiang H 2015 *Nano Lett.* **15** 3230
- [16] Checkelsky J G, Yoshimi R, Tsukazaki A, Takahashi K S, Kozuka Y, Falson J, Kawasaki M, Tokura Y 2014 *Nat. Phys.* **10** 731
- [17] Bestwick A J, Fox E J, Kou X, Pan L, Wang K L, Goldhaber-Gordon D 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 187201
- [18] Chang C Z, Zhao W, Kim D Y, Zhang H, Assaf B A, Heiman D, Zhang S C, Liu C, Chan M H W, Moodera J S 2015 *Nat. Mater.* **14** 473
- [19] Ou Y, Liu C, Jiang G, Feng Y, Zhao D, Wu W, Wang X X, Li W, Song C, Wang L L, Wang W, Wu W, Wang Y, He K, Ma X C, Xue Q K 2018 *Adv. Mater.* **30** 1703062
- [20] Otrokov M M, Rusinov I P, Blanco-Rey M, Hoffmann M, Vyazovskaya A Y, Ereemeev S V, Ernst A, Echenique P M, Arnau A, Chulkov E V 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 107202
- [21] Zhang D, Shi M, Zhu T, Xing D, Zhang H, Wang J 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 206401
- [22] Otrokov M M, Klimovskikh I I, Chulkov E V 2019 *Nature* **576** 416
- [23] Wang S, Yu Z, Liu Y, Jiao Y, Guan S, Sheng X, Yang S A 2019 *Phys. Rev. Materials* **3** 084201
- [24] Kong X, Li L, Leenaerts O, Wang W, Liu X, Peeters F M 2018 *Nanoscale* **10** 8153
- [25] Gong C, Li L, Li Z, Ji H, Stern A, Xia Y, Cao T, Bao W, Wang C, Wang Y, Qiu Z Q, Cava R J, Louie S G, Xia J, Zhang X 2017 *Nature* **546** 265
- [26] Huang B, Clark G, Navarro-Moratalla E, Klein D R, Cheng R, Seyler K L, Zhong D, Schmidgall E, McGuire M A, Cobden D H, Yao W, Xiao D, Jarillo-Herrero P, Xu X 2017 *Nature* **546** 270
- [27] Zhang Z, Shang J, Jiang C, Rasmita A, Gao W, Yu T 2019 *Nano Lett.* **19** 3138
- [28] Kresse G, Hafner J 1993 *Phys. Rev. B* **47** 558
- [29] Blochl P E 1994 *Phys. Rev. B* **50** 17953
- [30] Dudarev S L, Botton G A, Savrasov S Y, Humphreys C J, Sutton A P 1998 *Phys. Rev. B* **57** 1505
- [31] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [32] Mostofi A A, Yates J R, Lee Y S, Souza I, Vanderbilt D, Marzari N 2008 *Comput. Phys. Commun.* **178** 685
- [33] Wu Q S, Zhang S N, Song H F, Troyer M, Suluyanov A A 2018 *Comput. Phys. Commun.* **224** 405
- [34] Zhuang H L, Henning R G 2013 *Appl. Phys. Lett.* **103** 212102
- [35] Evans R F, Fan W J, Chureemart P, Ostler T A, Ellis M O, Chantrell R W 2014 *J. Phys. Condens. Matter.* **26** 103202
- [36] Thouless D J, Kohmoto M, Nightingale M P, den Nijs M 1982 *Phys. Rev. Lett.* **49** 405
- [37] Zhang R W, Zhang C W, Ji W X, Yan S S, Yao Y G 2017 *Nanoscale* **9** 8207
- [38] Reis F, Li G, Dudy L, Bauernfeind M, Glass S, Hanke W, Thomale R, Schäfer J, Claessen R 2017 *Science* **357** 287

Room-temperature quantum anomalous Hall effect in monolayer BaPb with large magnetocrystalline anisotropy energies^{*}

Zhang Wei-Xi Li Yong Tian Chang-Hai She Yan-Chao[†]

(Department of Physics and Electronic Engineering, Tongren University, Tongren 554300, China)

(Received 4 January 2021; revised manuscript received 17 March 2021)

Abstract

The quantum anomalous Hall effect is an intriguing quantum state that exhibits chiral edge states in the absence of a magnetic field. The chiral edge states are topologically protected and robust against electron scattering, which possesses great potential applications in designing low energy consumption and dissipation less spintronic devices. The experimental conditions are required to be very high, such as extremely low temperature (< 100 mK) due to the small band gap and the greatly accurate control of the extrinsic impurities. These greatly hinder their devices from being put into applications further. Hence, it would be meaningful to search for a new Chern insulator with a large band gap and high Curie temperature. According to the first-principles calculations, we predict the room temperature quantum anomalous Hall effect in the monolayer BaPb. The nontrivial topology of this new type of ferroelectric semi-metal material derives from fully spin-polarized quadratic non-Dirac bands. The quantum anomalous Hall effect can be realized in the monolayer BaPb with fully spin-polarized quadratic $p_{x,y}$ non-Dirac bands with the nonzero Chern number ($C = 1$). Because of the trigonal symmetry of monolayer BaPb material, these bands composed of $p_{x,y}$ orbitals are at the Γ point, which is different from the Dirac state formed by the p_z orbital reported previously. In addition, it can still retain its original topological properties even if strongly hybridized with the substrate. The calculated phonon spectrum shows no imaginary frequency in the entire Brillouin zone, indicating that the monolayer BaPb system is dynamically stable. By using Monte Carlo simulation, we determine the Curie temperature of BaPb monolayer to reach up to 378 K. We also calculate the magnetic anisotropy energy of the BaPb cell, defined as $\Delta E = E_{100} - E_{001}$. Here, we consider two magnetization easy-axis directions, [100] and [001]. To our surprise, the MAE of monolayer BaPb is as high as 52.01 meV/cell by considering the spin-orbit coupling effect. Furthermore, the nontrivial band gap is opened with a magnitude of 177.39 meV when the spin-orbit coupling effect is included. The calculations of Berry curvature and edge states further prove that the monolayer BaPb system can realize the quantum anomalous Hall state. This discovery indicates that the monolayer BaPb materials can be used as a candidate for quantum anomalous Hall effect materials, thereby promoting the development of spintronics.

Keywords: quantum anomalous Hall effect, quadratic non-Dirac bands, ferromagnetic half-metallicity, first-principle

PACS: 75.70.AK, 73.22.-f, 73.43.-f

DOI: 10.7498/aps.70.20210014

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12064038), the Scientific Research Program of Guizhou Province, China (Grant Nos. KY[2019]179, KY[2017]315, TK[2021] General projects -034), the Outstanding Young Science and Technology Talents of Guizhou Province, China (Grants No. [2019]5673), and the Science and Technology Foundation of Tongren Science and Technology Bureau, China (Grant No. [2020]77).

[†] Corresponding author. E-mail: yceshe@xtu.edu.cn