

# 物理所预言立方对称性破缺下的新型 拓扑绝缘体材料

拓扑绝缘体已成为材料研究领域中的“明星”，吸引着众多科学家的目光，理论和实验两方面的研究工作进展都极为迅速。拓扑绝缘体是一种新奇的量子物态，具有绝缘体和导体双重特性，通过引入超导序和铁磁序，拓扑绝缘体可能在量子计算机和自旋电子学等领域有着潜在的广泛应用。然而，要实现这些应用，首先需要寻找性能优良的拓扑绝缘体材料。当前被实验证实的拓扑绝缘体材料种类和数量还非常有限，受实际生长条件、特别是如何与当前的半导体工艺匹配等问题的限制，在这些材料中实现上述应用仍是相当困难的。

最近，中科院物理研究所/北京凝聚态物理国家实验室（筹）姚裕贵研究员和博士生冯万祥、丁俊，与美国橡树岭国家实验室的肖笛博士合作，在拓扑绝缘体材料预测和设计方面取得重要进展。在前期研究工作基础上[*Phys. Rev. Lett.* 105, 096404 (2010); *Phys. Rev. B* 82, 235121 (2010)]，他们利用自己独立研制的  $Z_2$  拓扑不变量第一性原理计算程序，又成功预言了在黄铜矿三元化合物家族中存在着大量拓扑绝缘体材料，这些材料有望弥补现存拓扑绝缘体材料的不足。

黄铜矿化合物具有类闪锌矿结构，有两个自由的结构参数  $\eta$  和  $\delta u$ （见图 1），由于存在化学压力，在黄铜矿化合物结构中通常存在轻微结构扭曲导致  $\eta \neq 1$  和  $\delta u \neq 0$ 。进一步考虑到系统中有两个不同的阳离子，与闪锌矿和 Half-Heusler 等材料不同，黄铜矿化合物不再具有立方对称性。这样的结果就是黄铜矿化合物能带中类  $\Gamma_8$  态四重简并不再受立方对称性的保护，而是劈裂成两个双重简并。基于这个对称性破缺，在反带的情形下，黄铜矿化合物不需要应变就可能形成一个自然的能隙，并成为拓扑绝缘体。图 2 显示了黄铜矿化合物  $AuTlTe_2$ 、 $AuTlS_2$  的能带结构可以通过具有反带结构的  $HgTe$  化学绝热演化而得到。对于类闪锌矿结构材料，反带结构是非平庸拓扑性质的标识，通过  $Z_2$  拓扑不变量的计算确认，这里发现具有反带结构的  $AuTlS_2$  是一个很好的拓扑绝缘体。通过对黄铜矿家族化合物  $I-III-VI_2$  ( $I = Cu, Ag, Au$ ;  $III = In, Tl$ ;  $V = S, Se, Te$ )， $II-IV-V_2$  ( $II = Zn, Cd, Hg$ ;  $IV = Ge, Sn$ ;  $V = As, Sb$ ) 的系统计算，他们进一步发现其中可能存在着大量的拓扑非平庸材料（见图 3）。黄铜矿化合物是类闪锌矿结构中目前为止第一个不加应变就可能实现拓扑非平庸态的三元化合物，除了结构相似性，它们的晶格常数与主流半导体的晶格常数相匹配（见图 3）。此外，目前在黄铜矿化合物中已发现室温铁磁体，这些有利条件都使得黄铜矿化合物在将来有着广泛的应用可能性。

本工作发表在 *Phys. Rev. Lett.* 106, 016402 (2011)，得到了国家自然科学基金委、科技部和中国科学院的资助。

相关文献：Wanxiang Feng, Di Xiao, Jun Ding, and Yugui Yao, *Three-Dimensional Topological Insulators in I-III-VI<sub>2</sub> and II-IV-V<sub>2</sub> Chalcopyrite Semiconductors*, *Phys. Rev. Lett.* 106, 016402 (2011).

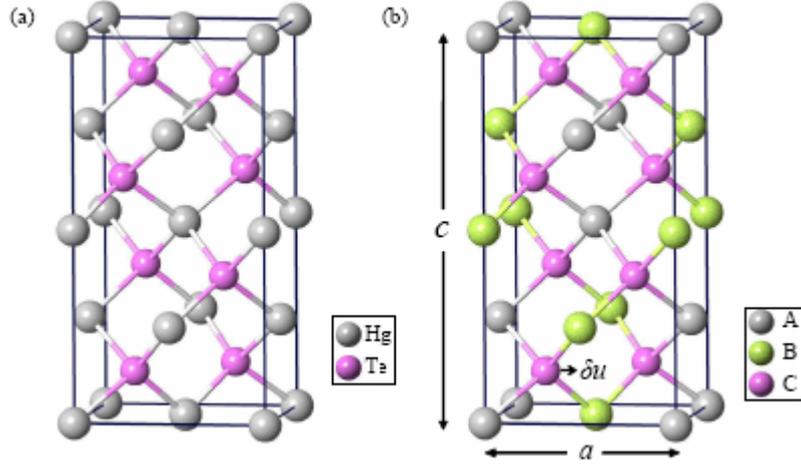


图 1: (a) 闪锌矿结构的 HgTe 化合物; (b) 黄铜矿结构的 ABC<sub>2</sub> 化合物, 两个结构参数为  $\eta=c/2a$  和  $\delta u=(R_{AC}^2-R_{BC}^2)/a^2$ , 其中的  $R_{AC}$ ,  $R_{BC}$  分别是阴离子 C 与两个最近邻阳离子 A, B 的距离。

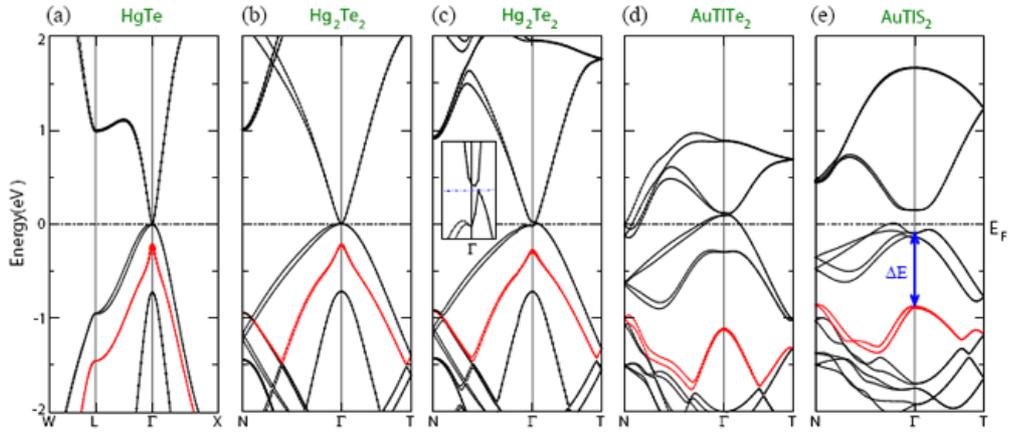


图 2: HgTe 与 AuTlTe<sub>2</sub>、AuTlS<sub>2</sub> 的能带结构比较。(a) 是 HgTe 的能带结构; (b) 是当 HgTe 形成理想的黄铜矿结构 ( $1\times 1\times 2$  超胞) 时的能带结构; (c) 是 HgTe 形成  $\eta=1.016$ ,  $\delta u=-0.018$  的黄铜矿结构时的能带结构。红色圆点的大小代表阳离子的 s 轨道占据概率, (c) 中插图表明在实际黄铜矿结构下 HgTe 能够自然地打开一个带隙; (d) (e) 分别是 AuTlTe<sub>2</sub>、AuTlS<sub>2</sub> 的能带结构, 它们具有与 HgTe 类似的反带特点, 显示了其非平庸的拓扑性质, (e) 中的  $\Delta E$  代表反带强度。

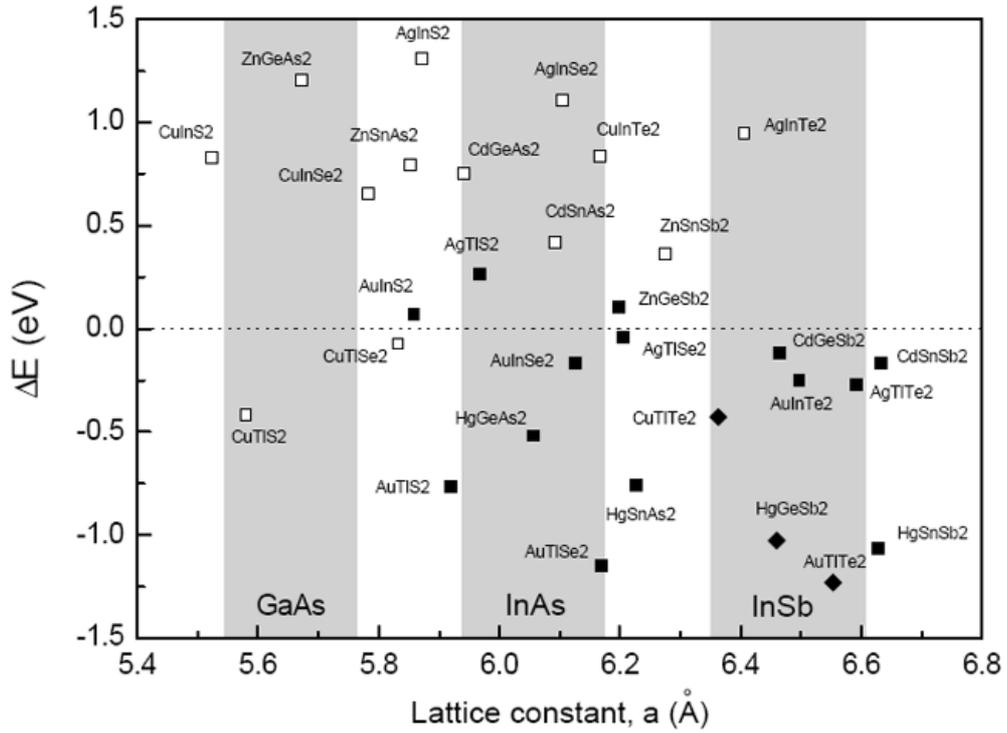


图 3: 黄铜矿家族化合物的反带强度, 反带强度定义为  $\Gamma_6$  态与价带顶的能量差。空心标识代表该材料的晶体结构常数来自于已有的相关文献, 其它化合物的晶体结构常数来自于第一性原理结构优化。当  $\Delta E < 0$  时, 方形代表拓扑绝缘体, 菱形代表拓扑金属。阴影区域表示黄铜矿化合物的晶格常数在  $\pm 2\%$  范围内与 GaAs、InAs 和 InSb 相匹配。