

清华大学优秀博士学位论文丛书

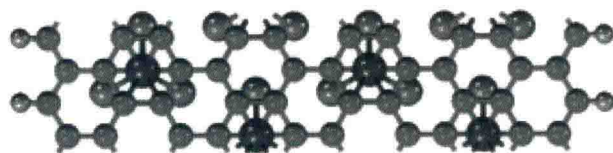


tsinghua
theses

磁掺杂拓扑绝缘体 拓扑性质研究及新型 拓扑材料的寻找

汤沛哲 著 Tang Peizhe

Topological Properties of Magnetically Doped
Topological Insulators and the Search of
New Topological Materials



清华大学出版社
TSINGHUA UNIVERSITY PRESS

清华大学优秀博士学位论文丛书

磁掺杂拓扑绝缘体 拓扑性质研究及新型 拓扑材料的寻找

汤沛哲 著 Tang Peizhe



Topological Properties of Magnetically Doped
Topological Insulators and the Search of
New Topological Materials

清华大学出版社
北京

内 容 简 介

拓扑绝缘体作为一种新奇的量子材料,因其奇异的量子性质和广阔的应用前景,现已成为凝聚态物理学最重要的研究热点之一。磁掺杂拓扑绝缘体,顾名思义,就是在拓扑绝缘体材料中掺入磁性元素,在体系本征的拓扑特性中引入铁磁序而形成的拓扑绝缘体。由于铁磁序的引入,体系丧失了时间反演对称性,使得磁掺杂拓扑绝缘体往往能够表现出与常规拓扑绝缘体迥异的电子结构性质。深刻地理解这些特性的物理起源,不仅可以深化人们对于拓扑绝缘体的认知,也可为未来设计基于拓扑绝缘体的自旋电子学器件奠定基础。

版权所有,侵权必究。侵权举报电话:010-62782989 13701121933

图书在版编目(CIP)数据

磁掺杂拓扑绝缘体拓扑性质研究及新型拓扑材料的寻找/汤沛哲著. —北京:清华大学出版社, 2018

(清华大学优秀博士学位论文丛书)

ISBN 978-7-302-49151-4

I. ①磁… II. ①汤… III. ①绝缘体-拓扑特点-研究 IV. ①TM21

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2017)第 322756 号

责任编辑:石磊

封面设计:傅瑞学

责任校对:刘玉霞

责任印制:宋林

出版发行:清华大学出版社

网 址: <http://www.tup.com.cn>, <http://www.wqbook.com>

地 址:北京清华大学学研大厦 A 座 邮 编:100084

社总机:010-62770175 邮 购:010-62786544

投稿与读者服务:010-62776969, c-service@tup.tsinghua.edu.cn

质量反馈:010-62772015, zhiliang@tup.tsinghua.edu.cn

印装者:三河市铭诚印务有限公司

经 销:全国新华书店

开 本:155mm×235mm 印 张:11.25 字 数:165千字

版 次:2018年11月第1版

印 次:2018年11月第1次印刷

定 价:99.00元

产品编号:072923-01

一流博士生教育

体现一流大学人才培养的高度（代丛书序）^①

人才培养是大学的根本任务。只有培养出一流人才的高校，才能够成为世界一流大学。本科教育是培养一流人才最重要的基础，是一流大学的底色，体现了学校的传统和特色。博士生教育是学历教育的最高层次，体现出一所大学人才培养的高度，代表着一个国家的人才培养水平。清华大学正在全面推进综合改革，深化教育教学改革，探索建立完善的博士生选拔培养机制，不断提升博士生培养质量。

学术精神的培养是博士生教育的根本

学术精神是大学精神的重要组成部分，是学者与学术群体在学术活动中坚守的价值准则。大学对学术精神的追求，反映了一所大学对学术的重视、对真理的热爱和对功利性目标的摒弃。博士生教育要培养有志于追求学术的人，其根本在于学术精神的培养。

无论古今中外，博士这一称号都是和学问、学术紧密联系在一起，和知识探索密切相关。我国的博士一词起源于 2000 多年前的战国时期，是一种学官名。博士任职者负责保管文献档案、编撰著述，须知识渊博并负有传授学问的职责。东汉学者应劭在《汉官仪》中写道：“博者，通博古今；士者，辩于然否。”后来，人们逐渐把精通某种职业的专门人才称为博士。博士作为一种学位，最早产生于 12 世纪，最初它是加入教师行会的一种资格证书。19 世纪初，德国柏林大学成立，其哲学院取代了以往神学院在大学中的地位，在大学发展的历史上首次产生了由哲学院授予的哲学博士学位，并赋予了哲学博士深层次的教育内涵，即推崇学术自由、创造新知识。

^① 本文首发于《光明日报》，2017 年 12 月 5 日。

哲学博士的设立标志着现代博士生教育的开端，博士则被定义为独立从事学术研究、具备创造新知识能力的人，是学术精神的传承者和光大者。

博士生学习期间是培养学术精神最重要的阶段。博士生需要接受严谨的学术训练，开展深入的学术研究，并通过发表学术论文、参与学术活动及博士论文答辩等环节，证明自身的学术能力。更重要的是，博士生要培养学术志趣，把对学术的热爱融入生命之中，把捍卫真理作为毕生的追求。博士生更要学会如何面对干扰和诱惑，远离功利，保持安静、从容的心态。学术精神特别是其中所蕴含的科学理性精神、学术奉献精神不仅对博士生未来的学术事业至关重要，对博士生一生的发展都大有裨益。

独创性和批判性思维是博士生最重要的素质

博士生需要具备很多素质，包括逻辑推理、言语表达、沟通协作等，但是最重要的素质是独创性和批判性思维。

学术重视传承，但更看重突破和创新。博士生作为学术事业的后备力量，要立志于追求独创性。独创意味着独立和创造，没有独立精神，往往很难产生创造性的成果。1929年6月3日，在清华大学国学院导师王国维逝世二周年之际，国学院师生为纪念这位杰出的学者，募款修造“海宁王静安先生纪念碑”，同为国学院导师的陈寅恪先生撰写了碑铭，其中写道：“先生之著述，或有时而不章；先生之学说，或有时而可商；惟此独立之精神，自由之思想，历千万祀，与天壤而同久，共三光而永光。”这是对一位学者的极高评价。中国著名的史学家、文学家司马迁所讲的“究天人之际、通古今之变，成一家之言”也是强调要在古今贯通中形成自己独立的见解，并努力达到新的高度。博士生应该以“独立之精神、自由之思想”来要求自己，不断创造新的学术成果。

诺贝尔物理学奖获得者杨振宁先生曾在20世纪80年代初对到访纽约州立大学石溪分校的90多名中国学生、学者提出：“独创性是科学工作者最重要的素质。”杨先生主张做研究的人一定要有独创的精神、独到的见解和独立研究的能力。在科技如此发达的今天，学术上的独创性变得越来越难，也愈加珍贵和重要。博士生要树立敢为天下先的志向，在独创性上下功夫，勇于挑战最前沿的科学问题。

批判性思维是一种遵循逻辑规则、不断质疑和反省的思维方式，具有批判性思维的人勇于挑战自己、敢于挑战权威。批判性思维的缺乏往往被认为是中国学生特有的弱项，也是我们在博士生培养方面存在的一个普遍

问题。2001年，美国卡内基基金会开展了一项“卡内基博士生教育创新计划”，针对博士生教育进行调研，并发布了研究报告。该报告指出：在美国和欧洲，培养学生保持批判而质疑的眼光看待自己、同行和导师的观点同样非常不容易，批判性思维的培养必须要成为博士生培养项目的组成部分。

对于博士生而言，批判性思维的养成要从如何面对权威开始。为了鼓励学生质疑学术权威、挑战现有学术范式，培养学生的挑战精神和创新能力，清华大学在2013年发起“巅峰对话”，由学生自主邀请各学科领域具有国际影响力的学术大师与清华学生同台对话。该活动迄今已经举办了21期，先后邀请17位诺贝尔奖、3位图灵奖、1位菲尔兹奖获得者参与对话。诺贝尔化学奖得主巴里·夏普莱斯（Barry Sharpless）在2013年11月来清华参加“巅峰对话”时，对于清华学生的质疑精神印象深刻。他在接受媒体采访时谈道：“清华的学生无所畏惧，请原谅我的措辞，但他们真的很有胆量。”这是我听到的对清华学生的最高评价，博士生就应该具备这样的勇气和能力。培养批判性思维更难的一层是要有勇气不断否定自己，有一种不断超越自己的精神。爱因斯坦说：“在真理的认识方面，任何以权威自居的人，必将在上帝的嬉笑中垮台。”这句名言应该成为每一位从事学术研究的博士生的箴言。

提高博士生培养质量有赖于构建全方位的博士生教育体系

一流的博士生教育要有一流的教育理念，需要构建全方位的教育体系，把教育理念落实到博士生培养的各个环节中。

在博士生选拔方面，不能简单按考分录取，而是要侧重评价学术志趣和创新潜力。知识结构固然重要，但学术志趣和创新潜力更关键，考分不能完全反映学生的学术潜质。清华大学在经过多年试点探索的基础上，于2016年开始全面实行博士生招生“申请-审核”制，从原来的按照考试分数招收博士生转变为按科研创新能力、专业学术潜质招收，并给予院系、学科、导师更大的自主权。《清华大学“申请-审核”制实施办法》明晰了导师和院系在考核、遴选和推荐上的权利和职责，同时确定了规范的流程及监管要求。

在博士生指导教师资格确认方面，不能论资排辈，要更看重教师的学术活力及研究工作的前沿性。博士生教育质量的提升关键在于教师，要让更多、更优秀的教师参与到博士生教育中来。清华大学从2009年开始探索将博士生导师评定权下放到各学位评定分委员会，允许评聘一部分优

秀副教授担任博士生导师。近年来学校在推进教师人事制度改革过程中，明确教研系列助理教授可以独立指导博士生，让富有创造活力的青年教师指导优秀的青年学生，师生相互促进、共同成长。

在促进博士生交流方面，要努力突破学科领域的界限，注重搭建跨学科的平台。跨学科交流是激发博士生学术创造力的重要途径，博士生要努力提升在交叉学科领域开展科研工作的能力。清华大学于2014年创办了“微沙龙”平台，同学们可以通过微信平台随时发布学术话题、寻觅学术伙伴。3年来，博士生参与和发起“微沙龙”12000多场，参与博士生达38000多人次。“微沙龙”促进了不同学科学生之间的思想碰撞，激发了同学们的学术志趣。清华于2002年创办了博士生论坛，论坛由同学自己组织，师生共同参与。博士生论坛持续举办了500期，开展了18000多场学术报告，切实起到了师生互动、教学相长、学科交融、促进交流的作用。学校积极资助博士生到世界一流大学开展交流与合作研究，超过60%的博士生有海外访学经历。清华于2011年设立了发展中国家博士生项目，鼓励学生到发展中国家亲身体验和调研，在全球化背景下研究发展中国家的各类问题。

在博士学位评定方面，权力要进一步下放，学术判断应该由各领域的学者来负责。院系二级学术单位应该在评定博士论文水平上拥有更多的权力，也应担负更多的责任。清华大学从2015年开始把学位论文的评审职责授权给各学位评定分委员会，学位论文质量和学位评审过程主要由各学位分委员会进行把关，校学位委员会负责学位管理整体工作，负责制度建设和争议事项处理。

全面提高人才培养能力是建设世界一流大学的核心。博士生培养质量的提升是大学办学质量提升的重要标志。我们要高度重视、充分发挥博士生教育的战略性、引领性作用，面向世界、勇于进取，树立自信、保持特色，不断推动一流大学的人才培养迈向新的高度。



清华大学校长

2017年12月5日

丛书序二

以学术型人才培养为主的博士生教育，肩负着培养具有国际竞争力的高层次学术创新人才的重任，是国家发展战略的重要组成部分，是清华大学人才培养的重中之重。

作为首批设立研究生院的高校，清华大学自 20 世纪 80 年代初开始，立足国家和社会需要，结合校内实际情况，不断推动博士生教育改革。为了提供适宜博士生成长的学术环境，我校一方面不断地营造浓厚的学术氛围，一方面大力推动培养模式创新探索。我校已多年运行一系列博士生培养专项基金和特色项目，激励博士生潜心学术、锐意创新，提升博士生的国际视野，倡导跨学科研究与交流，不断提升博士生培养质量。

博士生是最具创造力的学术研究新生力量，思维活跃，求真求实。他们在导师的指导下进入本领域研究前沿，吸取本领域最新的研究成果，拓宽人类的认知边界，不断取得创新性成果。这套优秀博士学位论文丛书，不仅是我校博士生研究工作前沿成果的体现，也是我校博士生学术精神传承和光大的体现。

这套丛书的每一篇论文均来自学校新近每年评选的校级优秀博士学位论文。为了鼓励创新，激励优秀的博士生脱颖而出，同时激励导师悉心指导，我校评选校级优秀博士学位论文已有 20 多年。评选出的优秀博士学位论文代表了我校各学科最优秀的博士学位论文的水平。为了传播优秀的博士学位论文成果，更好地推动学术交流与学科建设，促进博士生未来发展和成长，清华大学研究生院与清华大学出版社合作出版这些优秀的博士学位论文。

感谢清华大学出版社，悉心地为每位作者提供专业、细致的写作和出版指导，使这些博士论文以专著方式呈现在读者面前，促进了这些最新的优秀研究成果的快速广泛传播。相信本套丛书的出版可以为国内外各相

关领域或交叉领域的在读研究生和科研人员提供有益的参考，为相关学科领域的发展和优秀科研成果的转化起到积极的推动作用。

感谢丛书作者的导师们。这些优秀的博士学位论文，从选题、研究到成文，离不开导师的精心指导。我校优秀的师生导学传统，成就了一项项优秀的研究成果，成就了一大批青年学者，也成就了清华的学术研究。感谢导师们为每篇论文精心撰写序言，帮助读者更好地理解论文。

感谢丛书的作者们。他们优秀的学术成果，连同鲜活的思想、创新的精神、严谨的学风，都为致力于学术研究的后来者树立了榜样。他们本着精益求精的精神，对论文进行了细致的修改完善，使之在具备科学性、前沿性的同时，更具系统性和可读性。

这套丛书涵盖清华众多学科，从论文的选题能够感受到作者们积极参与国家重大战略、社会发展问题、新兴产业创新等的研究热情，能够感受到作者们的国际视野和人文情怀。相信这些年轻作者们勇于承担学术创新重任的社会责任感能够感染和带动越来越多的博士生们，将论文书写在祖国的大地上。

祝愿丛书的作者们、读者们和所有从事学术研究的同行们在未来的道路上坚持梦想，百折不挠！在服务国家、奉献社会和造福人类的事业中不断创新，做新时代的引领者。

相信每一位读者在阅读这一本本学术著作的时候，在吸取学术创新成果、享受学术之美的同时，能够将其中所蕴含的科学理性精神和学术奉献精神传播和发扬出去。



清华大学研究生院院长

2018年1月5日

导师序言

理解和认识物质的状态是凝聚态物理学研究的核心问题。那么用什么来刻画物质的状态呢？在之前漫长的研究过程中，人们认识到对称性是一个基本的物理概念，可以用来描述和界定物质的状态。每一种物质态的变化，往往对应着某种对称性的破缺。可以说在过去一百多年中，对于对称性的深刻认识是物理学取得的最伟大的成就之一。但是整数量子霍尔效应的发现让人们认识到，自然界中还存在另外一种深刻的数学概念可以刻画物质态的性质，这就是拓扑。拓扑这个概念是对一个物理系统整体性的描述；当两个系统具有不同的拓扑结构，并且相互连接时，在边界上就会出现一些奇异的物理现象，比如整数量子霍尔效应中量子化的霍尔电导，让人类第一次认识到拓扑的奇妙。

人类第一次将拓扑和具体材料相联系是在 2006 年。这一年，美国宾夕法尼亚大学的 C. L. Kane 教授和 E. J. Mele 教授在研究石墨烯中自旋轨道耦合效应时发现，自旋轨道耦合的存在可以改变石墨烯的拓扑结构，使其存在拓扑保护的边缘态，并且预言该系统可以实现量子自旋霍尔效应。但是由于石墨烯中的自旋轨道耦合强度太弱，这个现象一直没有在石墨烯中被观测到。2006 年美国斯坦福大学的张首晟教授研究组预测了第一种拓扑绝缘体材料——HgTe/CdTe 异质结，并且很快得到了实验证实。该工作实质性地推动了拓扑绝缘体的发展。量子自旋霍尔效应的发现，让拓扑在凝聚态物理学中成为热点。

量子反常霍尔效应，是霍尔效应家族中的最新被发现的重要成员。它要求一个物理系统在没有外加磁场的情况下，就能够拥有由边缘态贡献的量子化的霍尔电导。量子反常霍尔效应从提出到发现历时近 20 年。最

终，这个现象由清华大学的薛其坤教授研究组在磁性掺杂的拓扑绝缘体中观测到。该发现也促使人们更加深刻地理解了磁性与拓扑之间的关系。

沛哲同学的博士学位论文立足于已有的实验发现，试图去回答这样几个科学问题：

1. 在磁性掺杂拓扑绝缘体中，磁性原子是如何建立长程铁磁序，又是如何改变体系的拓扑状态的？

2. 既然在磁性掺杂拓扑绝缘体中存在铁磁有序，它们是否可以被调控，能否有实际的电子学或者自旋电子学应用？

3. 现有发现的拓扑绝缘体材料还有很多局限，比如能隙太小、实际工作温度不高等，那么是否还有更好的拓扑绝缘体材料？

沛哲同学在博士生研究期间对这几个问题进行了较深入的研究，取得了一定的科学成果。这些工作深化了人们对于磁性掺杂拓扑绝缘体的认识。比如，拓扑相变诱导磁性相变的工作揭示了磁性掺杂拓扑绝缘体薄膜中铁磁性质的拓扑起源；关于 Cr 掺杂 Bi_2Se_3 的研究工作诠释了 Cr 掺杂的各种拓扑绝缘体薄膜中迥异的磁性质的物理机制；而关于 Cr 掺杂 Sb_2Te_3 的研究工作设计了基于磁性掺杂拓扑绝缘体的自旋电子学器件，为该领域下一步的器件应用提供了理论基础。与此同时，基于第一性原理计算对于实际系统的准确描述，沛哲同学预测了一系列的拓扑材料，其中一些已经被实验合成，在未来拥有较广阔的应用前景。我们也期待这些工作能够对激发和促进未来该领域的发展，尤其是新材料的制备，发挥积极的作用。

沛哲同学的博士学位论文，结构完整，表述清晰，可以作为该领域科研工作者的参考读物。

段文晖

清华大学物理系

2016年8月

摘要

拓扑绝缘体呈现新奇的量子性质和广阔的应用前景，已成为凝聚态物理学研究的热点之一。由于磁性原子的引入破坏了体系的时间反演对称性，磁掺杂拓扑绝缘体表现出与常规拓扑绝缘体迥异的电子结构性质。深刻理解这些特性的物理起源，不仅可以深化人们对于拓扑绝缘体的认知，也可为未来设计基于拓扑绝缘体的自旋电子学器件奠定基础。同时，由于现有拓扑材料的局限，寻找拥有更优异性质的新型拓扑材料，也是拓扑绝缘体领域的热点研究方向。

在本文中，利用密度泛函理论和 $k\cdot p$ 低能有效模型，我们系统研究了 Cr 掺杂 Bi_2Se_3 族拓扑绝缘体的拓扑性质和磁性质。研究发现：

1. Cr 掺杂 Bi_2Se_3 的磁性质依赖于样品的制备方式：在采用分子束外延方法生长的样品中，替位掺杂的 Cr 倾向于聚集形成复合缺陷，对外不表现长程铁磁序，但其拓扑表面态存在能隙，且能隙大小依赖于电子掺杂浓度；而 Cr 蒸镀的 Bi_2Se_3 仍拥有无质量的 Dirac 费米子表面态，且没有长程铁磁序。这些性质表明在 Cr 掺杂 Bi_2Se_3 体系中很难实现量子反常霍尔效应。

2. Cr 掺杂 Sb_2Te_3 的量子薄膜存在 van Vleck 机制诱导的长程铁磁序，非常适合观察量子反常霍尔效应。在该薄膜系统中构建 PN 结，利用透射电子波在 PN 结界面的双折射现象，可以获得由门电压调控的自旋极化的量子透镜。

3. 在 Cr 掺杂 $\text{Bi}_2(\text{Se}_x\text{Te}_{1-x})_3$ 的系统中，Se/Te 组分 x 的变化会改变系统中有效自旋轨道耦合的强度，从而诱导拓扑相变；该拓扑相变会使系统的磁性质发生变化。

这些研究阐明了磁性掺杂 Bi_2Se_3 族拓扑绝缘体的磁性质与拓扑性质的关系,为进一步理解该体系的量子特性提供了物理图像;同时提出了调控其磁性质的手段,为稀磁拓扑绝缘体中磁性质调控和未来自旋电子学应用提供了物理背景。

同时,基于密度泛函理论,我们预测实验中已经合成的化合物 Bi_2TeI 是 \mathbb{Z}_2 (0,001) 类弱拓扑绝缘体; Mn 插层 SiC 外延石墨烯,锡烯的衍生物 SnX ($\text{X}=\text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}, \text{OH}$) 和哑铃状锡烯是二维拓扑绝缘体;但是,由于和衬底强烈的相互作用,生长在 Ag (111) 面的硅烯不是二维拓扑绝缘体。这一系列工作拓展了人们对新型拓扑材料的认知,为进一步寻找具有良好性质的拓扑器件奠定了材料基础。

关键词: 电子结构; 拓扑绝缘体; 密度泛函理论; 稀磁半导体; 低能有效理论

Abstract

Due to the exotic properties and potential applications, topological insulators (TIs) have attracted more and more attentions, and become one of the hottest topics in the condensed matter physics. Because of the breaking of time reversal symmetry (TRS), the electronic properties of the magnetically doped TI are in contradistinction to those of conventional TIs. Therefore, for the application in the spintronic devices, it is essential to deeply understand the physical picture in the magnetically doped TI. On the other hand, due to the limitation of the current TI materials, it is also important to find new topological materials with better electronic properties.

In this thesis, by using density functional theory (DFT) and low-energy effective model analysis, we systematically study the topological and magnetic properties of the magnetically doped TIs. It is found that:

1. The magnetic properties of Cr doped Bi_2Se_3 strongly depend on the fabrication methods: for the sample from molecular beam epitaxy (MBE), the substitutional Cr atoms tend to aggregate to superparamagnetic multimers in the Bi_2Se_3 matrix, which contribute to the chemical-potential-dependent gap opening in the Dirac surface states without long-range ferromagnetic order. While, on the Bi_2Se_3 surface deposited by Cr atoms, we cannot observe the long-range ferromagnetic order, but can find the gapless surface states. These properties suggest that Cr doped Bi_2Se_3 thin film is not a good candidate for the search of quantized anomalous Hall effect (QAHE).

2. For Cr doped Sb_2Te_3 , the long-range ferromagnetic order induced by van Vleck mechanics exists. Via fabricating PN junction in Cr doped Sb_2Te_3 thin film that is in the QAH phase, the field-effect birefringent spin lens can be realized and the coherent spin polarizations can be modulated by gate voltage.

3. For Cr doped $\text{Bi}_2(\text{Se}_x\text{Te}_{1-x})_3$, the variation of Se/Te ratio (x) changes the spin-orbit coupling (SOC) strength effectively and induce a topological quantum phase transition (QPT); furthermore, the topological QPT can induce a magnetic QPT.

All of these studies clarify the relationship between topological and magnetic properties in the magnetically doped TI, provide physical pictures for understanding these exotic phenomena and useful tools for tuning the magnetic prosperities which is essential for the future spintronic applications.

Meanwhile, by using DFT, we predict that: Bi_2TeI , a stoichiometric compound that is synthesized, is a weak TI; Mn-intercalated graphene on $\text{SiC}(0,001)$ substrate, SnX ($X=\text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}, \text{OH}$) and dumbbell stanene are two-dimensional TIs. In contrast, for the silicene on $\text{Ag}(111)$ surface, the strong hybridization with the substrate makes it a metal without topologically non-trivial property. These studies towards new topological materials suggest some good platforms for TI applications.

Key words: electronic structure, topological insulators, density functional theory, dilute magnetically doped semiconductor, low energy effective model

目录

第 1 章 绪论	1
1.1 引言	1
1.2 拓扑绝缘体简介	3
1.3 二维拓扑绝缘体	4
1.3.1 二维拓扑绝缘体 —— 石墨烯	4
1.3.2 二维拓扑绝缘体 —— HgTe 量子阱	7
1.3.3 二维拓扑绝缘体 —— 第二类半导体异质结	11
1.4 三维拓扑绝缘体	12
1.4.1 强拓扑绝缘体	13
1.4.2 弱拓扑绝缘体	22
1.5 磁性掺杂的拓扑绝缘体	23
1.5.1 磁性掺杂的二维拓扑绝缘体	25
1.5.2 磁性掺杂的 Bi_2Se_3 族材料薄膜	27
1.6 论文结构和主要内容	29
第 2 章 理论方法	31
2.1 引言	31
2.2 绝热近似	32
2.3 哈特里-福克近似	34
2.3.1 哈特里方程	34
2.3.2 福克近似	35
2.4 密度泛函理论	36
2.4.1 Hohenberg-Kohn 定理	36

2.4.2	Kohn-Sham 方程	37
2.4.3	交换关联泛函	38
2.5	最大局域化瓦尼尔函数	40
第 3 章	Cr 掺杂的 Bi_2Se_3 薄膜的磁性质	45
3.1	引言	45
3.2	计算方法	46
3.3	MBE 方法生长的 Cr 掺杂 Bi_2Se_3 薄膜	46
3.3.1	实验发现与困境	47
3.3.2	理论模拟和物理图像	51
3.4	Cr 沉积的 Bi_2Se_3 表面	56
3.4.1	实验发现	57
3.4.2	理论模拟和物理图像	59
3.5	本章小结	62
第 4 章	Cr 掺杂的 Bi_2Te_3 和 Sb_2Te_3 薄膜的拓扑性质	65
4.1	引言	65
4.2	实验发现	66
4.3	计算方法	68
4.4	Cr 掺杂 4QL Sb_2Te_3 薄膜的电子结构和拓扑性质	69
4.5	自旋极化的双折射	76
4.5.1	自旋分辨的量子聚焦	79
4.5.2	自旋分辨的量子幻影	80
4.6	本章小结	82
第 5 章	Cr 掺杂的 $\text{Bi}_2(\text{Se}_x\text{Te}_{1-x})_3$ 薄膜的拓扑性质	83
5.1	引言	84
5.2	实验发现	84
5.3	计算方法	88
5.4	Cr 掺杂 $\text{Bi}_2(\text{Se}_x\text{Te}_{1-x})_3$ 的拓扑性质	88
5.4.1	$\text{Cr}_y\text{Bi}_{2-y}\text{Se}_3$ 和 $\text{Cr}_y\text{Bi}_{2-y}\text{Te}_3$ 的拓扑相变	89