

拓扑绝缘体专题

编者按:拓扑绝缘体是最近几年发现的一种新的物质形态. 拓扑绝缘体所具有的特殊性质使其在未来的自旋电子学和量子计算等领域有潜在的重要的应用前景, 引起了科学界的广泛关注. 近期, 中国科学家在拓扑绝缘体的实验和理论研究方面取得了一系列的重要进展, 大大加深了人们对拓扑绝缘体的理解, 在国际学术界引起了广泛的影响. 本专题特别邀请了国内多位长期从事拓扑绝缘体研究的专家撰文, 介绍相关的前沿研究成果, 以飨读者.

拓扑绝缘体薄膜和有限尺寸效应^{*}

张翼¹ 何珂^{1, †} 马旭村¹ 薛其坤^{1, 2}

(1 中国科学院物理研究所 表面物理国家重点实验室 北京 100190)

(2 清华大学物理系 低维量子物理国家重点实验室 北京 100084)

摘要 拓扑绝缘体是近年来发现的一类新的量子材料, 已成为凝聚态物理的研究热点领域. 厚度仅几纳米的拓扑绝缘体薄膜不但具有奇特的物理性质, 而且还是拓扑绝缘体应用于平面器件的基础. 文章以 Bi_2Se_3 为例, 介绍了 Bi_2Se_3 家族拓扑绝缘体薄膜的分子束外延生长及其能带、自旋结构和拓扑性质随层厚的演化. 这些结果为人工调控拓扑绝缘体的电子结构和物理性质提供了指导.

关键词 拓扑绝缘体, Bi_2Se_3 , 分子束外延, 角分辨光电子能谱, 扫描隧道显微镜

Topological insulator thin films and finite size effects

ZHANG Yi¹ HE Ke^{1, †} MA Xu-Cun¹ XUE Qi-Kun^{1, 2}

(1 *State Key Lab for Surface Physics, Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China*)

(2 *State Key Lab of Low Dimensional Quantum Physics, Department of Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China*)

Abstract Topological insulators (TIs) are a new class of quantum matter which have attracted extensive interest recently. Nanometer thick TI thin films not only exhibit novel physical properties but also are useful for developing TI-based planar devices. Taking Bi_2Se_3 as an example, we report the molecular beam epitaxy growth of the Bi_2Se_3 family of TI thin films and the thickness dependent behavior of their band and spin structures and topological characteristics. The results provide information on the artificial control of the electronic structures and physical properties of TIs.

Keywords topological insulator, Bi_2Se_3 , molecular beam epitaxy, angle-resolved photoemission spectroscopy, scanning tunneling microscopy

拓扑绝缘体薄膜生长与栅电压调控输运特性研究^{*}

吴克辉[†] 李永庆^{††}

(中国科学院物理研究所 北京 100190)

摘要 文章讨论了三维拓扑绝缘体制备和输运性质研究方面的进展情况. 首先介绍了拓扑绝缘体材料和薄膜的制备, 并介绍了文章作者利用分子束外延方法, 在硅表面以及高介电常数材料钛酸锶表面生长高质量拓扑绝缘体 Bi_2Se_3 薄膜的工作. 然后介绍了拓扑绝缘体输运研究的现状, 以及文章作者在栅电压调控拓扑绝缘体外延薄膜的化学势和输运性质方面的研究成果.

关键词 拓扑绝缘体, 薄膜, 电子输运, Bi_2Se_3

Growth of topological insulator thin films and gate-controlled electron transport properties

WU Ke-Hui[†] LI Yong-Qing^{††}

(*Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China*)

Abstract We review the recent progress in the growth and electron transport studies of 3D topological insulators (TIs). The growth of bulk crystal and thin film TIs is discussed, followed by an introduction to our recent work on the growth of Bi_2Se_3 thin films on Si and high dielectric constant SrTiO_3 substrates. In the second part we discuss the current status of the study of TI electron transport properties, and our recent results on the tuning of the chemical potential and transport properties of epitaxial Bi_2Se_3 thin films on SrTiO_3 .

Keywords topological insulator, thin film, electron transport, Bi_2Se_3

拓扑绝缘体表面态的 STM 研究 *

程 鹏^{1,†} 张 童^{1,2} 何 珂² 陈 曦¹ 马旭村² 薛其坤^{1,2}

(1 清华大学物理系 低维量子物理国家重点实验室 北京 100084)

(2 中国科学院物理研究所 表面物理国家重点实验室 北京 100190)

摘 要 文章主要介绍了利用扫描隧道显微镜对拓扑绝缘体表面态进行的一系列研究工作,包括拓扑绝缘体表面态的电子驻波以及拓扑表面态的朗道量子化现象.这些工作对于拓扑绝缘体基本性质的确立以及深入理解具有十分重要的意义.

关键词 拓扑绝缘体,电子驻波,朗道量子化

Scanning tunneling microscope studies of topological insulators

CHENG Peng^{1,†} ZHANG Tong^{1,2} HE Ke² CHEN Xi¹ MA Xu-Cun² XUE Qi-Kun^{1,2}

(1 *State Key Laboratory of Low-Dimensional Quantum Physics and Department of Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China*)

(2 *State Key Laboratory for Surface Physics, Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China*)

Abstract We summarize recent scanning tunneling microscope studies of topological insulators, including the observation of electron standing waves and the Landau quantization of topological surface states. These works have contributed greatly to our understanding of topological insulators.

Keywords topological insulators, electron standing waves, Landau quantization

二维拓扑绝缘体退相干效应研究^{*}

江 华^{1,†} 成淑光² 孙庆丰³ 谢心澄^{1,4}

(1 北京大学国际量子材料科学中心 北京 100871)

(2 西北大学物理系 西安 710069)

(3 中国科学院物理研究所 北京 100190)

(4 美国奥克拉荷马州立大学物理系 奥克拉荷马州 74078)

摘 要 拓扑绝缘体是当前凝聚态物理研究的热点. 退相干效应对该体系的影响的研究不仅有重要的理论意义, 而且也是实现未来量子器件的不可或缺的前期工作. 文章作者从理论上研究了退相干对二维拓扑绝缘体特别是量子自旋霍尔效应的影响. 研究结果表明, 作为量子自旋霍尔效应的标志的量子化纵向电阻平台对不破坏自旋记忆的退相干效应(普通退相干)不敏感, 但却对破坏自旋记忆的退相干效应(自旋退相干)非常敏感. 因此, 该量子化平台只能在尺寸小于自旋退相干长度的介观样品中存在, 从而解释了量子自旋霍尔效应实验中所观测到的结果(见 *Science*, 2007, 318:766). 同时, 文章作者还定义了一个新的物理量, 即自旋霍尔电阻, 并发现该自旋霍尔电阻也有量子化平台. 特别是该量子化平台对两种类型的退相干都不敏感. 这说明在宏观样品中也能观测到自旋霍尔电阻的量子化平台, 因此更能全面地反映量子自旋霍尔效应的拓扑特性.

关键词 拓扑绝缘体, 量子自旋霍尔效应, 退相干

Two-dimensional dephasing effects in topological insulators

JIANG Hua^{1,†} CHENG Shu-Guang² SUN Qing-Feng³ XIE Xin-Cheng^{1,4}

(1 *International Center for Quantum Materials, Peking University, Beijing 100871, China*)

(2 *Department of Physics, Northwest University, Xian 710069, China*)

(3 *Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China*)

(4 *Department of Physics, Oklahoma State University, Stillwater, Oklahoma 74078, USA*)

Abstract Topological insulator is one of the most attractive areas in condensed matter physics in recent years. The study of the dephasing effect in such systems has important theoretical meanings and meanwhile, is inevitable for the realization of future quantum devices. In our studies of the influence of dephasing on the two-dimensional topological insulator, especially the quantum spin Hall effect, we find that the quantized longitudinal resistance plateaus are robust against normal dephasing but fragile to spin dephasing. Thus, these quantized plateaus can only survive in mesoscopic samples in which the spin coherence length is smaller than the sample size. Our results are in excellent agreement with experiments (*Science*, 2007, 318:766). In addition, we define a new spin Hall resistance that also exhibits quantum plateaus, which are robust against both normal and spin dephasings. These novel quantum plateaus can thus survive in macroscopic samples and better reflect the topological nature of the quantum spin Hall effect.

Keywords topological insulator, quantum spin Hall effect, dephasing

拓扑绝缘体电子态的电场调控

常 凯[†]

(中国科学院半导体研究所 半导体超晶格国家重点实验室 北京 100083)

摘 要 文章简要介绍了对拓扑绝缘体性质的电场控制,主要包括三维拓扑绝缘体表面磁性的电场控制、电子在 p-n 结中的类光输运行为以及拓扑绝缘体量子点的特性.

关键词 拓扑绝缘体, RKKY 相互作用, p-n 结, 量子点

Electrical control of electrons in topological insulators

CHANG Kai[†]

(*The State Key Laboratory for Superlattices and Microstructures, Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083, China*)

Abstract A brief introduction to the electrical control of magnetic and transport properties in topological insulators is presented. The paper includes: (i) electrical controllable surface magnetism in three-dimensional topological insulators; (ii) quasi-optical propagation behavior of electrons in topological insulator p-n junctions; (iii) topological insulator quantum dots.

Keywords topological insulator, RKKY interaction, p-n junction, quantum dot

Z_2 拓扑不变量与拓扑绝缘体^{*}

余睿 方忠 戴希[†]

(中国科学院物理研究所 北京 100190)

摘要 文章回顾了多种 Z_2 拓扑数的计算方法,并详细介绍了一种用非阿贝尔贝里联络表示绝缘体 Z_2 不变量的计算方法.这种方法可以确定出一般能带绝缘体的拓扑性质,而不需要限定波函数的规范.利用这种新方法,文章作者计算了二维石墨烯(graphene)系统的 Z_2 拓扑数,得到了和以前研究相一致的结论.

关键词 非阿贝尔贝里联络, 拓扑绝缘体, Z_2 拓扑数

Z_2 topological invariant and topological insulators

YU Rui FANG Zhong DAI Xi[†]

(*Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China*)

Abstract We briefly review some of the equivalent ways of determining the Z_2 invariant in 2D insulators. We introduce a new expression for this invariant in band insulators using non-Abelian Berry's connection. The new expression can be used to determine the topological nature of a general band insulator in a way that does not require any gauge fixing. By this means, we have recalculated the Z_2 topological index for 2D graphene systems, and have obtained results consistent with previous studies.

Keywords non-Abelian Berry's connection, topological insulator, Z_2 topological invariant

编者按:拓扑绝缘体是最近几年发现的一种新的物质形态. 拓扑绝缘体所具有的特殊性质使其在未来的自旋电子学和量子计算等领域有潜在的重要的应用前景, 引起了科学界的广泛关注. 近期, 中国科学家在拓扑绝缘体的实验和理论研究方面取得了一系列的重要进展, 大大加深了人们对拓扑绝缘体的理解, 在国际学术界引起了广泛的影响. 本专题特别邀请了国内多位长期从事拓扑绝缘体研究的专家撰文, 介绍相关的前沿研究成果, 以飨读者.

拓扑绝缘体薄膜和有限尺寸效应^{*}

张翼¹ 何珂^{1, †} 马旭村¹ 薛其坤^{1, 2}

(1 中国科学院物理研究所 表面物理国家重点实验室 北京 100190)

(2 清华大学物理系 低维量子物理国家重点实验室 北京 100084)

摘要 拓扑绝缘体是近年来发现的一类新的量子材料, 已成为凝聚态物理的研究热点领域. 厚度仅几纳米的拓扑绝缘体薄膜不但具有奇特的物理性质, 而且还是拓扑绝缘体应用于平面器件的基础. 文章以 Bi_2Se_3 为例, 介绍了 Bi_2Se_3 家族拓扑绝缘体薄膜的分子束外延生长及其能带、自旋结构和拓扑性质随层厚的演化. 这些结果为人工调控拓扑绝缘体的电子结构和物理性质提供了指导.

关键词 拓扑绝缘体, Bi_2Se_3 , 分子束外延, 角分辨光电子能谱, 扫描隧道显微镜

Topological insulator thin films and finite size effects

ZHANG Yi¹ HE Ke^{1, †} MA Xu-Cun¹ XUE Qi-Kun^{1, 2}

(1 State Key Lab for Surface Physics, Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

(2 State Key Lab of Low Dimensional Quantum Physics, Department of Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Abstract Topological insulators (TIs) are a new class of quantum matter which have attracted extensive interest recently. Nanometer thick TI thin films not only exhibit novel physical properties but also are useful for developing TI-based planar devices. Taking Bi_2Se_3 as an example, we report the molecular beam epitaxy growth of the Bi_2Se_3 family of TI thin films and the thickness dependent behavior of their band and spin structures and topological characteristics. The results provide information on the artificial control of the electronic structures and physical properties of TIs.

Keywords topological insulator, Bi_2Se_3 , molecular beam epitaxy, angle-resolved photoemission spectroscopy, scanning tunneling microscopy

1 引言

拓扑(topology)是近代数学的一个概念. 粗略地说, 拓扑性质是指一些对细节不敏感的性质. 例如一个有环形柄的茶杯的表面和一个轮胎的表面, 尽管它们外观有很大不同, 但却都有一个“洞”, 因此在拓扑上是等价的. 一个物体“洞”的数目就是一种对细节不敏感的拓扑特征. 材料的性质是由其能带结构决定的, 如果能带也能通过拓扑的方式表征, 那么这种材料将有可

能显示出对细节不敏感的物理性质. 量子霍尔效应就是这样一个例子. 在强磁场下二维电子系统形成了一系列分立的朗道能级, 因此可以看成一种绝缘体. 然而这种绝缘体的能带结构却具有和普通的绝缘体(例如金刚石、 Al_2O_3 、真空等)不同的拓扑特征. 这种拓扑特征导致了量子霍尔电阻, 其数值不会因为样品细节的

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 21025314; 10974231)、国家重点基础研究发展计划(批准号: 2009CB929400)资助项目

2011-05-30 收到

[†] 通讯联系人. Email: kehe@iphy.ac.cn

变化而改变. 由于这种随细节不敏感性, 现在量子霍尔电阻的国际推荐值已成为电阻的计量标准. 量子霍尔系统实际上就是一种磁场下的拓扑绝缘体^[1,2].

最近几年来, 人们认识到具有强自旋轨道耦合的窄带半导体在不外加磁场的情况下也有可能成为拓扑绝缘体. 与磁场下的量子霍尔系统类似, 这些材料的体能带在费米能级处具有能隙, 然而由于其体能带独特的拓扑性质, 在其表面或与普通绝缘体的界面上却总是具有无能隙的表面/界面态. 这种表面/界面态类似于石墨烯的能带结构, 具有线性色散关系的狄拉克锥形状. 然而与石墨烯不同的是, 拓扑绝缘体的表面/界面态(除了在动量空间某些对称点之外)是完全自旋极化的(见图 1). 更重要的是, 与以往发现的由表面悬挂键或表面势引起的表面态不同, 拓扑绝缘体的表面态是由体能带的拓扑性质决定的, 因此不易受到表面氧化和污染的破坏. 理论物理学家已预言了拓扑绝缘体具有很多新奇的量子现象, 往往不需要极端的条件就可以观测到这些量子现象. 例如拓扑绝缘体表面态与磁性材料的相互作用将有可能导致量子化反常霍尔效应、拓扑磁电效应、镜像磁单极子等现象, 拓扑绝缘体与超导材料的界面有可能出现马约拉纳(Majorana)量子态. 这些量子现象使得拓扑绝缘体有可能应用于自旋电子学和量子计算中, 并已迅速引起了凝聚态物理和材料科学众多研究者的兴趣^[1,2].

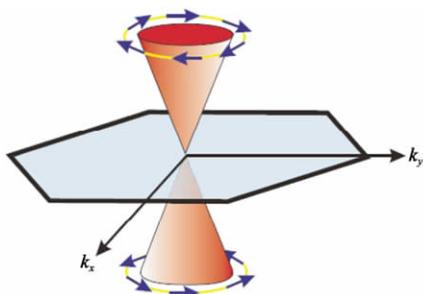


图 1 三维拓扑绝缘体表面态能带结构示意图(k_x 和 k_y 分别是 x 和 y 方向的波矢. 拓扑绝缘体表面态呈狄拉克圆锥结构, 狄拉克点为自旋简并态, 其他各点自旋是极化的, 狄拉克点上下的电子自旋和动量具有相反的手性)

拓扑绝缘体分为二维拓扑绝缘体和三维拓扑绝缘体. 二维拓扑绝缘体具有一维的拓扑边界态, 三维拓扑绝缘体具有二维的拓扑表面态. 目前只有 HgTe 量子阱在实验上被证明是二维拓扑绝缘体^[3,4], $\text{Bi}_2\text{Sb}_{1-x}$ 合金是人们首先发现的三维拓扑绝缘体材料^[5,6]. 然而, 目前研究最多的三维拓扑绝缘体材料是 Bi_2Se_3 家族材料: Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 和 Sb_2Te_3 ^[7,8], 因为这一类材料的特点是具有相对较

大的体能隙(其中 Bi_2Se_3 能隙是 0.3eV)和简单的表面能带结构(单个狄拉克锥), 而且还更容易制备.

如果将一个三维拓扑绝缘体材料的厚度减少到不能再被看作是一个三维材料时, 可以想象其能带、自旋结构和拓扑性质都会发生根本的改变. 实际上, 已有若干理论工作探索了三维拓扑绝缘体在厚度很小时电子性质的变化^[9-11]. 这些工作表明, 三维拓扑绝缘体在很薄的时候有可能转变成二维拓扑绝缘体, 而这种转变过程伴随着二维拓扑绝缘体相和普通绝缘体相之间随厚度的交替转变. 这意味着如果将 Bi_2Se_3 家族三维拓扑绝缘体材料做成薄膜, 并能对其厚度精确控制, 就有可能获得二维拓扑绝缘体材料. 这将是 HgTe 量子阱之外另一类新的二维拓扑绝缘体材料. 同时, 薄膜形态的拓扑绝缘体的一个突出优点是, 其电子和自旋结构受厚度、表面、界面等因素影响很大, 因此, 可以方便地通过控制这些参数来剪裁拓扑绝缘体的电子和自旋结构, 这对拓扑绝缘体的研究和应用都具有很重要的意义. 此外, 现在的半导体工业主要是基于平面工艺, 生长在基底上的拓扑绝缘体薄膜将更容易采用传统的半导体技术工艺加工成器件, 投入实际应用.

分子束外延(molecular beam epitaxy, MBE)是半导体工业和研究常用的一种薄膜生长方法. 这种方法可以制备出质量非常高的单晶薄膜, 并可以以单原子层的精确度实现对薄膜厚度的控制. 我们下面介绍 Bi_2Se_3 族拓扑绝缘体薄膜的 MBE 制备. 通过优化生长条件, 我们实现了薄膜的逐层生长. 在此基础上还将介绍利用原位角分辨光电子能谱(angle-resolved photoemission spectroscopy, ARPES)和扫描隧道显微镜(scanning tunneling microscope, STM)对拓扑绝缘体的能带、自旋结构和拓扑性质随薄膜厚度演化过程的研究^[12,13].

2 拓扑绝缘体薄膜的外延生长

图 2(a)是 Bi_2Se_3 的晶体结构示意图. Bi_2Se_3 是一种层状材料, 由 2 个 Bi 单原子层和 3 个 Se 单原子层交替组成一个共 5 个原子层的周期结构, 称为 5 原子层(quintuple layer, 简称 QL, 高度为 0.95nm , 是 Bi_2Se_3 薄膜厚度的单位, 每 3 个 QL 又组成一个大的周期结构). 在每个 QL 内, 原子层间的相互作用是较强的共价键. 但在 QL 与 QL 之间是较弱的范德瓦尔斯力的相互作用. Bi_2Te_3 和 Sb_2Te_3 也具有类似的晶格结构^[7]. 我们选用双层石

墨烯终止的 6H-SiC(0001) 作为衬底生长 Bi_2Se_3 薄膜. 这种衬底的优点是: (1) 具有大面积和原子级平整的表面; (2) 具有较好的化学惰性, 不会与具有较强氧化性能的 Se 起反应; (3) 由于 Bi_2Se_3 和石墨均为层状材料, 因此在其界面上主要也是范德瓦尔斯型的弱相互作用. 这使得衬底和薄膜晶格失配所导致的应力能对生长的影响很小. 因此双层石墨终止的 6H-SiC(0001) 为高质量 Bi_2Se_3 外延薄膜的生长提供了一个很好的衬底^[12].

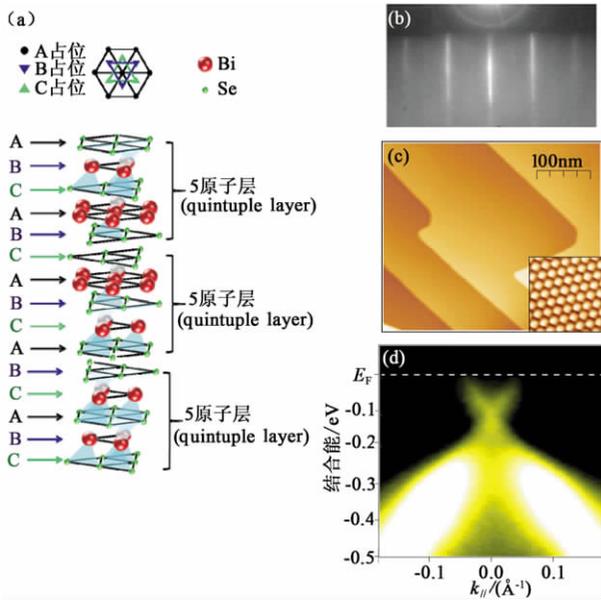


图 2 (a) 拓扑绝缘体 Bi_2Se_3 的晶体结构示意图; (b) Bi_2Se_3 薄膜的 RHEED 图案; (c) Bi_2Se_3 薄膜的 STM 图, 插图为原子分辨像; (d) 50QL Bi_2Se_3 薄膜沿 Γ -K 方向的 ARPES 谱, 可以看到狄拉克点位于费米能级以下 0.12eV 处. ((b)-(d) 图片引自文献^[13])

在生长过程中, 我们通常把衬底温度 T_{sub} 控制在介于 Bi 源温度和 Se 源温度之间, 即 $T_{\text{Se}} < T_{\text{sub}} < T_{\text{Bi}}$, 而将 Bi 和 Se 的束流比控制在 1:10 左右. 由于衬底温度高于 Se 源的蒸发温度, 所以蒸发出的 Se 原子/分子并不能单独吸附在光滑的石墨表面, 只有当 Bi 原子吸附在衬底表面时, Se 才会与 Bi 反应形成化合物. 因此, 薄膜最终的生长速率是由 Bi 的束流决定的. 富 Se 的生长环境可以有效地减少 Bi_2Se_3 薄膜的 Se 空位密度, 从而降低电子掺杂的浓度^[12,13].

图 2(b) 是 Bi_2Se_3 薄膜的反射式高能电子衍射 (reflective high energy electron diffraction, RHEED) 图样, 显示出我们的样品是高质量的单晶薄膜. 图 2(c) 是 Bi_2Se_3 薄膜表面的 STM 图像, 插图为小范围原子分辨图像, 显示出 Bi_2Se_3 薄膜具有原子级平整的表面和很低的缺陷密度, 其质量远好于

高温烧结的 Bi_2Se_3 单晶样品. 表面台阶的高度是 1QL. 由于 QL 与 QL 之间的相互作用远弱于 QL 内部的原子层与原子层之间的相互作用, 因此每个 QL 的表面具有更低的表面自由能. 所以在薄膜表面只呈现 QL 的表面. 图 2(d) 是一个厚度为 50QL Bi_2Se_3 薄膜的 ARPES 谱图, 我们可以看到, 在 Γ 点附近, 有一清晰的狄拉克圆锥样的表面态, 显示出我们生长的 Bi_2Se_3 薄膜确实为拓扑绝缘体. 更重要的是, 薄膜的狄拉克点位于费米面以下 0.12eV 处, 费米能级基本上处于体能隙之中^[8]. 而高温烧结的 Bi_2Se_3 单晶样品, 其狄拉克点一般位于 0.3eV 左右, 费米能级穿过导带, 也就是说, 材料处于重电子掺杂状态. 这种情况对于探测拓扑表面态的性质非常不利, 其体载流子会掩盖表面态的贡献. Bi_2Se_3 的电子掺杂主要来自于 Se 空位. MBE 生长的薄膜具有较少的 Se 空位, 因此具有较低的掺杂浓度.

通过对生长条件的精确控制, 我们可以实现 Bi_2Se_3 薄膜的逐层生长. 图 3 显示了一系列不同厚度薄膜垂直方向的光电子能谱. 图中短竖线所指示的是由于量子限制效应体能带形成的量子阱态. 量子阱态的峰位对薄膜厚度非常敏感. 随着薄膜厚度逐渐增加, 我们发现峰位并非连续移动, 而是一套峰逐渐消失, 另一套峰逐渐出现. 这反映了在厚度每增加一层时量子阱态峰位的变化. 这些观测说明, 薄膜是逐层生长的. 在只有一套峰出现的谱线(图 3 中加深的谱线), 它所对应的薄膜, 在宏观范围基本上具有均一的厚度^[13].

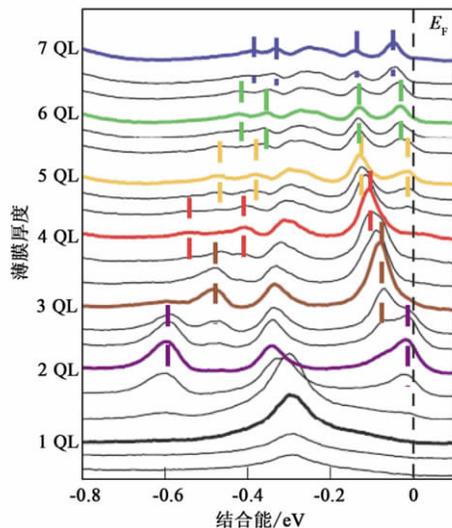


图 3 不同厚度 Bi_2Se_3 薄膜垂直方向的光电子能谱 (相邻谱线对应的厚度差约为 0.3 QL, 图中的短竖线指示了量子阱态的峰位(图片引自文献^[13]))

3 Bi₂Se₃ 族拓扑绝缘体的有限尺寸效应

Bi₂Se₃ 族材料逐层外延生长的实现为研究三维拓扑绝缘体的有限尺寸效应提供了可能. 图 4(a)–(f)是室温条件下测得的层厚从 1QL 到 6QL 的 Bi₂Se₃ 薄膜的 ARPES 谱^[13]. 从谱图中可以看到, 与厚度较大的 Bi₂Se₃ 薄膜相比, 厚度小的 Bi₂Se₃ 薄膜的能带结构发生了很大的变化, 主要表现在:

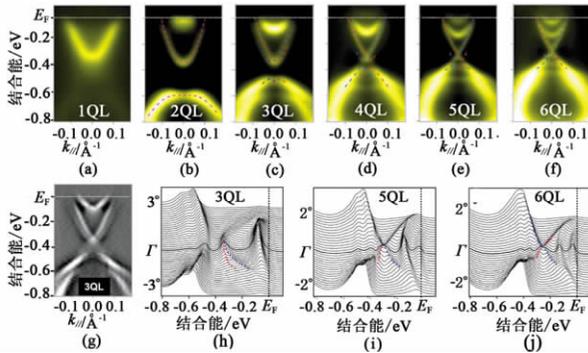


图 4 (a)–(f)为厚度从 1QL 到 6QL 的 Bi₂Se₃ 薄膜的 ARPES 能带图, 测量温度为室温; (g) 为 3QL Bi₂Se₃ 薄膜的 ARPES 二次微分能带图; (h)–(j) 为 3QL, 5QL 和 6QL Bi₂Se₃ 薄膜的角分辨光电子能谱的能量分布曲线图; (b) 图中紫红色(见本期《物理》网刊彩图, 下同)曲线是(1)式对该谱的拟合曲线; (c)–(f) 图中红色和蓝色曲线是(2)式的拟合曲线. 相应的拟合参数列在表 1 中(图片引自文献^[13])

(1) 当薄膜层厚小于 6QL 时, 原本无能隙的表面态开始出现一个明显的能隙. 图 6(h)–(j) 是厚度分别为 3QL, 5QL 和 6QL 薄膜的不同角度能量分布曲线 (energy distribution curves, EDC). 从 EDC 谱可以明显地看出, 6QL (图 4(j)) 的薄膜仍然具有清晰的狄拉克点, 从 5QL (图 4(i)) 开始, 能隙开始出现并随着厚度的减小开始变大. 图 5(a) 给出了 Bi₂Se₃ 薄膜表面态能隙与层厚的关系.

(2) 当薄膜层厚介于 2QL 和 6QL 之间时, 除了

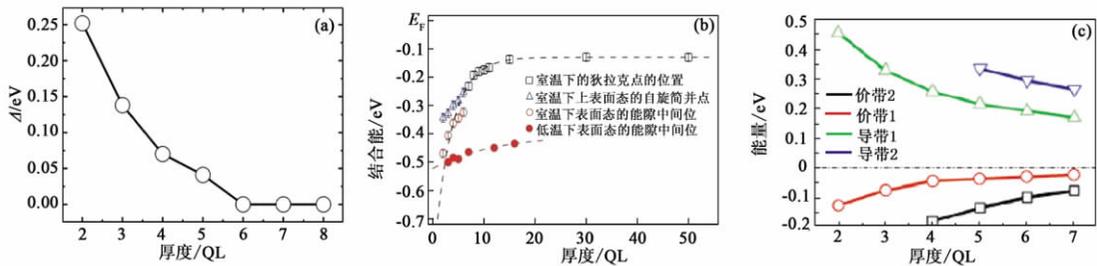


图 5 (a) 能隙大小随薄膜厚度的变化关系图; (b) 狄拉克点位置 ($\geq 6QL$) (空心方块)、上表面态自旋筒并点 ($< 6QL$) (空心三角) 及能隙中间位 ($< 6QL$) (空心圆点) 在室温条件下随薄膜厚度的变化关系, 红色实心圆点是低温 ($\sim 150K$) 条件下能隙中间位随薄膜层厚的变化关系; (c) 量子阱态峰相对于能隙中间位的能量随薄膜层厚的变化(图片引自文献^[13])

存在能隙外, 上表面态还发生了明显的劈裂. 这种劈裂在 Γ 点消失, 而在远离 Γ 点的位置变得明显, 它是一种类似于 Rashba 型的劈裂^[14]. Rashba 效应是指具有强自旋轨道耦合的电子系统在一个垂直电场作用下, 其电子能带在动量方向上出现自旋劈裂, 其特点是在 Γ 点没有自旋劈裂. 我们从 EDC 谱 (图 4(h)–(i)) 和 ARPES 的二次微分谱 (图 4(g)) 上可以更清楚地观测到这种劈裂. 与传统的 Rashba 自旋劈裂不同, 该劈裂形成的上表面态外分支的信号强度明显地弱于内分支. 我们用二次曲线对上表面态进行拟合, 得到了劈裂表面态的 Rashba 系数 α_R , 示于表 1 的最右列. 我们发现, 随着厚度的减小, 劈裂也随之明显地变小, 厚度到 2QL 时, 能带劈裂完全消失.

(3) 除了薄膜层厚度小于 6QL 时的能隙和类 Rashba 劈裂外, 薄层薄膜的化学势也随膜厚变化. 对于 50QL 的薄膜, 其狄拉克点位于费米面以下 0.12eV 处 (图 2(d)), 但是对 6QL 的薄膜, 其狄拉克点位于费米面以下约 0.26eV 处 (图 4(f)), 这说明其化学势发生了明显的改变. 图 5(b) 给出了从 2QL 到 50QL 的狄拉克点位置的数据 (因薄膜层厚度在 6QL 以下时出现能隙, 故以上表面态交叉点位置和能隙中间位置代替狄拉克点位置), 从图中可以看到, 在 Bi₂Se₃ 薄膜层厚度低于约 20QL 时, 狄拉克点逐渐远离费米能级, 也就是说, 薄膜被电子掺杂.

除此之外, 我们还利用 ARPES 谱观测到表面态上下的近抛物线形的能带. 图 5(c) 显示了这些能带在 Γ 点的峰位 (扣除了化学势的影响) 随厚度的变化, 显示出明显的量子阱态特征. 因此, 处于表面态上下的这些能带分别为导带和价带电子的量子阱态.

当拓扑绝缘体变得很薄的时候, 一个表面的表面态电子会隧穿过体能隙到达另一个表面. 因此两个表面的表面态波函数会发生交叠. 假设一个自由的 Bi₂Se₃ 薄膜的模型 (不考虑衬底的影响), 其两个表面

具有相同的化学势,这样两个表面的狄拉克表面态在动量空间是完全重叠的.对于非狄拉克点位置的能态,两个表面态相同动量和能量的电子具有不同的自旋,因此当两个表面态在实空间逐渐交叠时只是产生自旋简并,并不会产生能带色散关系的变化.而对于已处于自旋简并态的狄拉克点,当两个表面能态交叠时,由于泡利不相容原理而产生能量的变化,最终导致在狄拉克点出现一个能隙.能隙的大小与两个表面态的交叠程度有关.相应的理论模型给出了超薄拓扑绝缘体薄膜表面态的色散关系^[11]:

$$E_{\pm}(k_{\parallel}) = E_0 - Dk_{\parallel}^2 \pm \sqrt{(\nu_F \hbar k_{\parallel})^2 + \left(\frac{\Delta}{2} - Bk_{\parallel}^2\right)^2}, \quad (1)$$

其中 k_{\parallel} 代表平面内的波矢, E_0 代表能隙中间的能量, D 和 B 是与厚度有关的参量, ν_F 代表费米速度(在这里是指狄拉克费米子的速度), Δ 代表能隙的大小, \hbar 代表普朗克常数, \pm 分别表示能隙上下的两个表面态. (1) 式解释了实验上观测到的能隙的出现, 但未能解释 Rashba 型的自旋劈裂现象. 这是由于它基于的模型是一个自由的拓扑绝缘体薄膜, 并没有考虑衬底的作用. 衬底的存在会打破薄膜的空间反演对称性, 使两个表面的化学势出现差异. 我们在自由薄膜模型的基础上引入沿薄膜垂直方向的势能项作为衬底对薄膜的影响, 于是可以得到下式所示的表面态的色散关系^[15]:

$$E_{\sigma\pm}(k_{\parallel}) = E_0 - Dk_{\parallel}^2 \pm \sqrt{(|\tilde{V}| + \alpha_F \hbar k_{\parallel})^2 + \left(\frac{\Delta}{2} - Bk_{\parallel}^2\right)^2}, \quad (2)$$

其中 \tilde{V} 是新加入的势能项的结果, 实际上代表了两个表面的化学势差的一半, 只有当势能是具有空间反演对称性的时候, 此项才不为零. \pm 号分别表示能隙上下的两个表面态. σ 取值为 +1 或 -1, 分别代表电子的两种自旋. 在(1)式中, 2 条自旋简并的能带在(2)式中劈裂成 4 条自旋非简并的能带. 因此, 考虑了薄膜的空间反演不对称性的公式(2), 既可以获得能

隙的打开, 又可以获得 Rashba 型的劈裂. 图 4(a) — (f) 中红色和蓝色的虚线表示出根据(2)式对 ARPES 数据拟合的结果. 表 1 中列出了拟合参数.

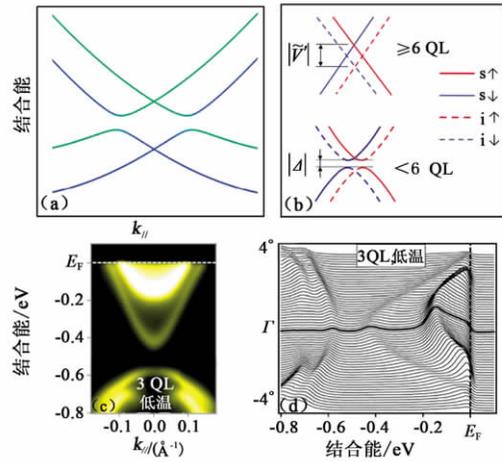


图 6 (a) 理论计算的 5QL 薄膜的表面态实空间分布图(绿色实线表示位于上表面的表面态, 蓝色实线表示位于界面处的表面态); (b) 厚度大于或等于 6QL(上图)和小于 6QL(下图)的薄膜表面态结构示意图($s \uparrow$ 和 $s \downarrow$ 分别表示表面处自旋向上和自旋向下的能态, $i \uparrow$ 和 $i \downarrow$ 分别表示界面处自旋向上和自旋向下的能态); (c) 低温($\sim 150\text{K}$)条件下测得的 3QL 薄膜的 ARPES 能带图; (d) 低温($\sim 150\text{K}$)条件下测得的 3QL 薄膜的 ARPES EDC 图(图片引自文献^[13])

为了进一步理解这个结果, 我们在图 6(a) 中展示了理论计算的 5QL Bi_2Se_3 薄膜表面态的实空间的分布. 图中绿色和蓝色的实线分别代表位于表面和界面处的表面能带的成分. 我们可以看到, 能隙之上表面态的外面两支和能隙之下表面态的里面两支主要分布在界面处, 而能隙之上表面态的里面两支和能隙之下表面态的外面两支主要分布在表面处. 这一结果可以用简单的图像加以解释: 如图 6(b) 所示, 在薄膜厚度小于 6QL 时, 原来表面和界面的两个化学势不同的狄拉克型(图 6(b)上)的表面态发生了杂化, 其结果就是出现了能隙和 Rashba 型的劈裂(图 6(b)下), 而所观测到的上表面态外面两支的强度随薄膜厚度增加而变弱, 就是因为随着薄膜厚度的增加, 界面处的狄拉克表面态渐渐远离

表 1 (1) 式和(2)式对图 4(b)和图 4(c) — (f) 的拟合参量及相应的 Rashba 参量 α_R (引自文献^[13])

薄膜厚度/QL	E_0/eV	$D/(\text{eV} \cdot \text{\AA}^2)$	Δ/eV	$B/(\text{eV} \cdot \text{\AA}^2)$	$\nu_F/(10^5 \text{ m/s})$	$ \tilde{V} /\text{eV}$	$\alpha_R/(\text{eV} \cdot \text{\AA})$
2	-0.470	-14.4	0.252	21.8	4.71	0	0
3	-0.407	-9.7	0.138	18.0	4.81	0.038	0.71
4	-0.363	-8.0	0.070	10.0	4.48	0.053	1.27
5	-0.345	-15.3	0.041	5.0	4.53	0.057	2.42
6	-0.324	-13.0	0	0	4.52	0.068	2.78

ARPES 的探测深度。

薄膜界面和表面化学势的差别有两种可能性：其一是由表面和界面不同的环境造成的；其二是薄膜与衬底电荷转移导致薄膜内部的能带弯曲。在前一种情况，表面和界面的化学势的差别随膜厚应该基本不变；而在后一种情况，化学势的差别应该随膜厚减小而减小。从拟合结果还可以看出，两个表面的化学势差和 Rashba 劈裂随厚度减小而逐渐变小（见表 1）。对 2QL 的薄膜，几乎不能辨认出 Rashba 劈裂。这个结果表明，主要是衬底诱导的薄膜能带弯曲造成了界面化学势和表面化学势的不同。

半导体表面附近的能带弯曲可以通过表面光伏（surface photovoltage, SPV）效应进行调控。光电子能谱所用的紫外光可以在能带中激发电子—空穴对。尚未复合的电子和空穴在空间电荷层电场的作用下会在空间中分离，其结果是原本弯曲的能带会变平^[16,17]。由于低温下电子—空穴复合效率降低，因此 SPV 效应在低温的情况下更为显著。图 6(c) 显示了 3QL 样品在 150K 下 ARPES 测量的结果，图 6(d) 显示了相应的 EDC 曲线。我们发现，Rashba 劈裂消失了。图 5(b) 的实心红色数据点显示了室温和低温下化学势随厚度的变化。我们发现，低温下表面化学势随厚度的变化比室温下要小得多。这证明了 SPV 效应的存在，并证明了所观测到的 Rashba 自旋轨道劈裂确实是由薄膜的能带弯曲造成的。由于能带弯曲也可以通过门电压来控制，这就意味着 Rashba 型的自旋劈裂也可以通过门电压来控制，这为我们设计一类新型的自旋场效应管器件提供了重要的思路。

现在我们讨论薄膜的拓扑性质。三维拓扑绝缘体的薄膜既有可能是普通绝缘体，也有可能是二维拓扑绝缘体。W. Y. Shan 等人提出，这两种不同的拓扑相会反映在表面态色散关系公式(2)中。当公式中的 B 和 Δ 具有相同的符号（正号或负号）时，薄膜为二维拓扑绝缘体；具有相反符号时，薄膜为普通绝缘体。我们的拟合结果（见表 1）表明，薄膜厚度在 2QL 到 6QL 之间时， B 和 Δ 为同号，似乎都处于二维拓扑绝缘体的相。然而由于 ARPES 只能反映能隙的大小而不是符号的差异，上面的判断并不是决定性的。利用输运测量是否存在量子自旋霍尔效应，或者利用 STM 测得是否存在边界态可以用来证明这些薄膜是否为二维拓扑绝缘体。

4 总结与展望

我们利用分子束外延技术，成功地在 6H-SiC (0001) 外延双层石墨烯衬底上生长出高质量的拓扑绝缘体 Bi_2Se_3 单晶薄膜，并通过对其生长条件的控制，实现了对其层厚的精确控制。通过原位的 ARPES 研究，我们发现了在薄膜厚度小于 6QL 时， Bi_2Se_3 薄膜上下两个狄拉克表面态的杂化所导致的能隙，并观测到由于两个表面化学势不同所导致的 Rashba 型自旋轨道劈裂。MBE 生长的量子薄膜也在 Bi_2Te_3 ^[18] 和 Sb_2Te_3 ^[19] 材料中实现，并观测到类似的有限尺寸效应。

拓扑绝缘体的量子薄膜的实现为探索诸多量子现象提供了材料基础。例如，如果通过在材料中掺入磁性杂质，将铁磁序引入 Bi_2Se_3 拓扑绝缘体量子薄膜，将有可能观测到人们长期探寻的量子化反常霍尔效应。这意味着不需要外磁场就可以观察到量子霍尔效应，并将很容易地应用到电子器件之中。此外，人们还在拓扑绝缘体量子薄膜中预言了巨大的热电效应和激子凝聚等现象。拓扑绝缘体薄膜的这些独特的性质加上其电子、自旋结构和拓扑性质的可调控性，使其无论是在拓扑绝缘体相关问题的基础研究方面，还是在未来的应用方面，都具有重要的意义。

参考文献

- [1] Qi X L *et al.* Phys. Today, 2010, 63: 33
- [2] Hasan M Z *et al.* Rev. Mod. Phys., 2010, 82: 3045
- [3] Bernevig B A *et al.* Science, 2006, 314: 1757
- [4] König M *et al.* Science, 2007, 318: 766
- [5] Fu L *et al.* Phys. Rev. Lett., 2007, 98: 106803
- [6] Hsieh D *et al.* Nature, 2008, 452: 970
- [7] Zhang H J *et al.* Nat. Phys., 2009, 5: 438
- [8] Xia Y *et al.* Nat. Phys., 2009, 5: 398
- [9] Linder J *et al.* Phys. Rev. B, 2009, 80: 205401
- [10] Liu C X *et al.* Phys. Rev. B, 2010, 81: 041307(R)
- [11] Lu H Z *et al.* Phys. Rev. B, 2010, 81: 115407
- [12] Song C L *et al.* Appl. Phys. Lett., 2010, 97: 143118
- [13] Zhang Y *et al.* Nat. Phys., 2010, 6: 584
- [14] Bychkov Y A *et al.* Jetp Lett., 1984, 39: 78
- [15] Shan W Y *et al.* New J. Phys., 2010, 12: 043048
- [16] Demuth J E *et al.* Phys. Rev. Lett., 1986, 56: 1408
- [17] Alonso M *et al.* Phys. Rev. Lett., 1990, 64: 1947
- [18] Li Y Y *et al.* Adv. Mater., 2010, 22: 4002
- [19] Wang G *et al.* Nano Res., 2010, 3: 874

拓扑绝缘体薄膜生长与栅电压调控输运特性研究*

吴克辉[†] 李永庆^{††}

(中国科学院物理研究所 北京 100190)

摘要 文章讨论了三维拓扑绝缘体制备和输运性质研究方面的进展情况. 首先介绍了拓扑绝缘体材料和薄膜的制备, 并介绍了文章作者利用分子束外延方法, 在硅表面以及高介电常数材料钛酸锶表面生长高质量拓扑绝缘体 Bi_2Se_3 薄膜的工作. 然后介绍了拓扑绝缘体输运研究的现状, 以及文章作者在栅电压调控拓扑绝缘体外延薄膜的化学势和输运性质方面的研究成果.

关键词 拓扑绝缘体, 薄膜, 电子输运, Bi_2Se_3

Growth of topological insulator thin films and gate-controlled electron transport properties

WU Ke-Hui[†] LI Yong-Qing^{††}

(*Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China*)

Abstract We review the recent progress in the growth and electron transport studies of 3D topological insulators (TIs). The growth of bulk crystal and thin film TIs is discussed, followed by an introduction to our recent work on the growth of Bi_2Se_3 thin films on Si and high dielectric constant SrTiO_3 substrates. In the second part we discuss the current status of the study of TI electron transport properties, and our recent results on the tuning of the chemical potential and transport properties of epitaxial Bi_2Se_3 thin films on SrTiO_3 .

Keywords topological insulator, thin film, electron transport, Bi_2Se_3

1 引言

1980年, K. V. Klitzing 发现将二维电子系统放在磁场中时, 样品的电导随磁场变化产生以 e^2/h 为单位的量子化台阶, 其精度可达到 10^{-8} , 这就是著名的量子霍尔效应(QHE), 它是一种在宏观尺度上的量子效应. 1986年, 崔琦、Stomer 和 Laughlin 又发现电导随磁场变化产生 e^2/h 分数倍的量子化台阶, 即所谓分数量子霍尔效应(FQHE). 量子霍尔态的研究对凝聚态物理学的影响非常深远. 这个领域的研究已经产生出一大批有影响的新概念、新理论和新方法. 整数和分数量子霍尔效应的发现者分别获得了 1985 年和 1998 年的诺贝尔物理奖. 此外,

2010 年的诺贝尔物理奖也与在石墨烯(graphene)中观察到量子霍尔效应有一定关系. 美国物理学会的凝聚态物理最高奖 Buckley 奖也有至少 1/4 与在该领域做出过重要贡献的理论和实验物理学家有关. 最近, 关于量子霍尔物理的研究又直接推动了量子自旋霍尔效应和拓扑绝缘体这两个重要新发现.

量子霍尔效应来源于在强磁场中二维电子气形成的分立朗道能级. 当费米面位于 2 个朗道能级之间

* 国家自然科学基金(批准号:10874210;10974240)、国家重点基础研究发展计划(批准号:2007CB936800;2009CB929101)资助项目
2011-06-10 收到

[†] Email: khwu@iphy.ac.cn

^{††} Email: yqli@iphy.ac.cn

时,样品内部实际上是绝缘的,但电子却可以绕着样品的边界跳跃前进,正是这种边缘导电形成了量子化电导. Thouless 等人的工作揭示出霍尔电导的精确量子化与拓扑不变量(TKNN 数或陈数)的直接联系. 但是,量子霍尔系统的形成需要外加磁场,所以它不是固体本身的特征. 人们自然想到,能否在不加外磁场的条件下,通过固体自身的能带结构的作用来产生类似的拓扑性质? 从上世纪 80 年代开始,就陆续有理论家对此进行了研究,并在近几年取得了突破性进展. 2005 年, Kane 和 Mele 提出了新的固体能带拓扑理论^[1]. 2006 年,美国斯坦福大学的张守晟小组从理论上预言, HgTe/CdTe 量子阱结构是二维拓扑绝缘体^[2],并迅速为德国伍尔兹堡大学的研究组所证实^[3]. 2009 年,中国科学院物理研究所的方忠、戴希研究组与斯坦福大学的张守晟等人合作,预言了 Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 等三维强拓扑绝缘体材料^[4],并几乎同时被普林斯顿大学的 Hasan 小组以及斯坦福大学的沈志勋小组的实验验证^[5,6]. 随即,三维拓扑绝缘体迅速成为凝聚态物理研究领域的爆发性热点.

对于拓扑绝缘体的研究最初是由理论推动的,在过去几年中,关于拓扑绝缘体的理论研究得到了很大发展. 但实验研究只能是循序渐进的. 在初期,实验上最主要的目标是验证拓扑绝缘体的特殊能带结构. 通过角分辨光电子能谱(ARPES)对表面电子结构的直接观察,人们已经观察到 Bi_2Se_3 (Bi_2Te_3) 的表面态及其线性色散的 Dirac 锥结构^[5-8]. 通过使用扫描隧道显微镜(STM)对 Bi_2Se_3 (Bi_2Te_3) 表面上电子受非磁性杂质散射形成的驻波进行观察,也验证了表面态的线性色散关系,以及由于表面态电子自旋-动量锁定造成背散射被抑制的效果^[9,10]. 另外,通过对强磁场下表面电子形成的朗道能级的扫描隧道谱(STS)观察,也证明了其有别于普通二维电子气,而有与石墨烯类似的朗道能级能谱结构^[11,12]. 这些实验结果已可证明关于拓扑绝缘体的基本物理图像的正确性. 但令人感到失落的是,关于拓扑绝缘体的重要物理效应的预言,如 Majorana 费米子^[13]、磁单极^[14]、量子化反常霍尔效应^[15]等,迄今尚未得到证实.

虽然理论上关于拓扑绝缘体有种种令人激动的预言,但当前实验上仍有两个非常基础的问题迫切需要解决:首先是制备出高质量的拓扑绝缘体材料特别是薄膜材料,其次是在运输实验中确认拓扑绝缘体表面态的本征性质. 本文将简要综述近年来拓扑绝缘体生长和运输性质研究两方面的实验进展. 限于篇幅,本文主要围绕作者近年来在这两方面的

工作,以及我们所感兴趣的文献展开,因此并没有覆盖所有的相关文献. 本文第二节概述拓扑绝缘体的材料制备的进展状况,主要包括体材料制备和外延生长薄膜两部分. 在第三节中,我们对拓扑绝缘体量子运输研究的现状作一个概述,随后介绍我们在栅电压调控拓扑绝缘体外延薄膜的运输性质方面的研究进展. 最后,基于作者的认识,对拓扑绝缘体领域在实验上面临的困难和前景作一个概述.

2 拓扑绝缘体的制备

2.1 体材料的制备

Bi_2Se_3 (Bi_2Te_3) 作为传统的热电材料早已存在,并广泛应用于半导体制冷器件中,针对其制备和电子能带结构的研究也已经进行了几十年. Bi_2Se_3 (Bi_2Te_3) 是 V-VI 族化合物半导体,具有斜方六面体结构,如图 1 所示. 以 Bi_2Se_3 为例,它的每个原胞由五层(quintuple layer, QL)原子沿三重轴(c 轴),按 Se-Bi-Se-Bi-Se 交替密排的方式堆叠而成. 在原胞内, Bi, Se 原子之间以共价键结合;在两个原胞之间, Se 原子层间以范德瓦尔斯力结合,使得晶体容易沿两个原胞之间解理. 制备 Bi_2Se_3 (Bi_2Te_3) 单晶材料相对简单,只要将 Bi 与 Se(或 Bi 与 Te)两种材料按适当化学配比混合,放置在密闭容器中长时间恒温加热,使之晶化,再缓慢降温,就可以获得 Bi_2Se_3 (Bi_2Te_3) 单晶.

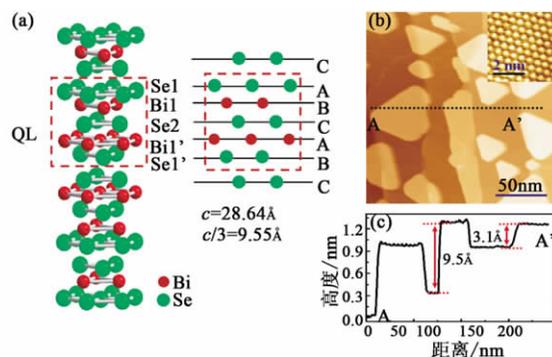


图 1 (a) 拓扑绝缘体 Bi_2Se_3 的原子结构示意图; (b) 使用分子束外延方法在 Si(111) 表面获得的原子级平整 Bi_2Se_3 薄膜的典型形貌,表面上不满层的 Bi_2Se_3 形成三角形的岛; (c) 截面曲线测量得到所有岛的高度都是 0.95 nm, 对应于一个 Bi_2Se_3 原胞的尺寸

对于热电应用而言,并不需要获得特别高的晶体纯度,也不特别需要单晶薄膜. 甚至人们有意将薄膜制备成多晶或多层结构,以抑制薄膜中的声子的热传导. 因此,过去对于高质量的 Bi_2Se_3 (Bi_2Te_3) 单晶材料 and 薄膜材料的制备方面的努力远远不够.

结果是,当人们因为发现这类材料是三维拓扑绝缘体而兴奋不已时,却又沮丧地发现,这种所谓的“绝缘体”根本不绝缘.由于 Bi_2Se_3 中的 Se 易于缺失而产生空位,Se 空位本身是一种 n 型的杂质,这导致未掺杂的 Bi_2Se_3 总是具有良好电性的 n 型半导体,其体电子浓度常在 10^{17}cm^{-3} 到 10^{19}cm^{-3} 之间.而对于 Bi_2Te_3 而言,Bi 原子与 Te 原子却容易形成反位缺陷而引入载流子.不绝缘的“拓扑绝缘体”在电输运测量中产生很大的体电导背景,掩盖了本来就微弱的表面态电导特征,给拓扑绝缘体的输运性质研究带来严重的困难.

从 2009 年开始,针对拓扑绝缘体研究的需求,人们从单晶体材料和薄膜两方面着手进行材料制备的研究.首先是试图提高单晶体材料的质量,如进行 p 型掺杂以降低体电子浓度,并提高材料的迁移率等.这方面的例子包括:斯坦福大学的沈志勋小组在 Bi_2Te_3 中掺入 Sn,通过角分辨光电子能谱 (ARPES) 观察到,随着掺杂浓度的增加,费米能级的位置从价带底移动到导带顶^[6];普林斯顿大学的 Cava 和 Hasan 小组在 Bi_2Se_3 中掺杂 Ca,也获得了类似的费米能级移动以及表面态的 Dirac 锥的圆形截面的观察^[5].这些工作说明,通过掺杂获得 p 型的 Bi_2Se_3 (Bi_2Te_3) 拓扑绝缘体材料是可行的.问题是,由于 Bi_2Se_3 (Bi_2Te_3) 的带隙很小,绝大多数 p 掺杂之后的样品仍然导电,电阻率通常在 $\text{m}\Omega \cdot \text{cm}$ 量级.同时,由于未掺杂材料的电子浓度很高,需要进行很高浓度的 p 型掺杂才能获得明显的效果.例如,在 Bi_2Se_3 中掺 Ca 时,经常使用的浓度在 0.5% 到 2% 之间,而半导体 Si 中的典型掺杂浓度为 10^{-7} .这样高浓度的掺杂会引入很多缺陷,严重降低材料的载流子迁移率.而高迁移率对于观察一些量子输运现象(如 Shubnikov-de Haas (SdH) 振荡和量子霍尔效应等)是关键的.鉴于通过掺杂的方法获得高体电阻的 Bi_2Se_3 (Bi_2Te_3) 单晶的困难,一些人开始寻找具有高体电阻的拓扑绝缘体新材料.美国斯坦福加速器实验室的 Fisher 小组在 Bi_2Se_3 中掺入大量 Sb 制备 $\text{Bi}_x\text{Sb}_{2-x}\text{Se}_3$,将体材料的载流子浓度降低到 $\sim 10^{-16}\text{cm}^{-3}$ 量级^[16].Sb 在材料中取代 Bi,由于 Sb 是 Bi 的等电子杂质,因此 Sb 并不提供载流子,但 Sb 的存在有利于降低 Se 空位的浓度,从而可以降低体材料的载流子浓度.这使他们能够在脉冲强磁场 (60 T) 下观察到具有二维特征的 SdH 振荡.

基于类似的想法,最近,日本大阪大学的安藤阳一小组对比 Bi_2Se_3 (Bi_2Te_3) 晶体中的缺陷形成机

制,制备出了 $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$ 单晶材料^[17].这种三元材料具有与 Bi_2Se_3 (Bi_2Te_3) 完全一致的层状构型,只是将纯 Bi_2Se_3 原胞中的 Se-Bi-Se-Bi-Se 的层状交替排列改变成 Te-Bi-Se-Bi-Te 的层状排列.由于 Se 原子被两层 Bi 原子夹在原胞的中心,因此能够抑制 Se 空位的产生.同时,由于 Bi 与 Se 原子之间的键合很强,使得 Bi 与 Te 原子之间的反位缺陷也受到抑制.此外,这种新材料具有完全有序的晶体结构,并不存在 Se 与 Te 之间的替代无序性.安藤等人在这种材料的解理薄片上测量到电阻率达到 $1\Omega \cdot \text{cm}$.随后,美国普林斯顿大学的 Cava 与 Ong 小组报道了这种材料在低温下的电阻率可高达 $6\Omega \cdot \text{cm}$ ^[18].

2.2 薄膜的分子束外延生长

薄膜对于器件研究的重要性是不言而喻的,几乎所有的半导体电子器件和发光器件都是以薄膜为基础而制作的.与体材料相比,薄膜的优点在于:(1)容易制成具有不同功能的多层结构,如 p-n 结和异质结等,而异质结构对于探索拓扑绝缘体—磁性材料的拓扑磁电效应以及拓扑绝缘体—超导材料的近邻效应等十分重要^[19].(2)可以利用栅电压产生的场效应对器件性质进行调控,如金属—氧化物—半导体场效应晶体管 (MOSFET) 等.利用栅电压调节,可以实现对载流子浓度的调节,甚至可改变载流子类型.更为重要的是,栅电压提供的连续而精确的调节能力对于观察有关拓扑绝缘体的各种新奇物理效应而言是极为重要的,例如理论上提出的量子化的反常霍尔效应^[15]、Majorana 费米子的干涉效应^[13]等实验,都需要把样品中的费米能级调节到体带隙甚至是 Dirac 点附近.

实际上,基于提高热电优值的考虑,人们很早就已经开始制备 Bi_2Se_3 (Bi_2Te_3) 薄膜,并成功地使用多种方法获得薄膜样品,如:电沉积^[20]、化学浴沉积^[21]、连续离子层吸附反应^[22]、热蒸发^[23]、反应蒸发^[24]、MOCVD^[25]、化合物蒸发^[26],等等.但这些针对热电应用制备出的样品都是比较粗糙的多晶薄膜.2008 年,方忠等人对 Bi_2Se_3 (Bi_2Te_3) 材料开展计算,并发现其有可能是新型拓扑绝缘体时,我们推断这类层状材料应该易于采用分子束外延 (MBE) 方法进行单晶薄膜制备,并很快在 Si(111) 衬底上使用 MBE 方法制备出了 Bi_2Se_3 单晶薄膜^[27].

使用 Si(111) 衬底是基于两方面考虑:一方面 Si 是半导体工业中最重要的材料,使用以 Si 为衬底或许有利于将拓扑绝缘体器件与当前的半导体器件技术集成;另一方面,Si 的 (111) 面与 Bi_2Se_3 的

(0001)面具有相同的六方结构,且晶格常数相差不大($a_{\text{Si}} = 3.84 \text{ \AA}$, $a_{\text{Bi}_2\text{Se}_3} = 4.14 \text{ \AA}$),因而有利于获得高质量的 Bi_2Se_3 薄膜. 由于清洁 Si(111) 表面是 7×7 再构的,其表面原子起伏大,并存在相当多的 Si 悬挂键,所以我们在使用时,首先在 Si(111) 7×7 表面上制备出 Bi 原子修饰的 $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Bi 再构表面,以消除 7×7 的再构,使表面的 Si 原子层恢复成体相的 1×1 排列. 实验表明,这个步骤对于获得高质量单晶 Bi_2Se_3 薄膜是相当重要的.

我们采用两种方法进行了 Bi_2Se_3 薄膜的生长. 第一种方法是将适当配比的 Bi 和 Se 同时蒸发到保持在室温的衬底上,然后再进行退火处理,得到单晶薄膜. 我们使用反射式高能电子衍射 (RHEED) 观察到:在退火之前,薄膜只表现出非常弱的 RHEED 图样,这表明此时薄膜基本还没有晶化;而在退火后,RHEED 图样转变为高质量单晶薄膜特征性的锐利直线. 第二种方法是在衬底加温条件下共沉积 Bi 和 Se,生长过程开始后,RHEED 图样迅速由 Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 图样转变为 Bi_2Se_3 的 1×1 图样,并可以观察到清晰的 RHEED 振荡. 无论采用哪种方法,只要控制合适的 Bi 蒸发量和衬底温度,便可以得到原子级平整的 Bi_2Se_3 薄膜. 图 2 显示我们在硅表面得到的从 1QL 到 4QL 厚度的 Bi_2Se_3 薄膜. 在不同厚度下均可实现原子级平整的薄膜. 考虑到 Se 相对于 Bi 具有很高的蒸汽压,容易从加温的衬底上脱附,在上述两种方法中均采用了过量的 Se. 实验结果表明,薄膜的厚度仅取决于 Bi 的蒸发量而与 Se 的蒸发量无关,所以过量的 Se 应该在加温的过程中从衬底上脱附掉了^[27].

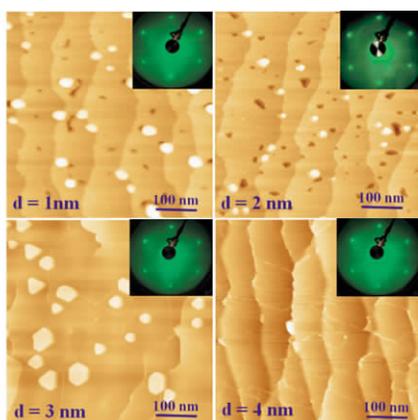


图 2 在硅表面得到的从 1QL 到 4QL 厚度的 Bi_2Se_3 薄膜(在不同厚度下均可实现原子级平整的薄膜)

利用 STM 观察表面形貌,我们还发现了 Bi_2Se_3 薄膜生长中的特征性的“5 层原胞”生长模式

(见图 1(b))^[27]. 对于不是完整层数的薄膜(即表面上存在“岛”或者“孔洞”的情况),我们用 STM 观察了岛或孔洞的高度,发现对于所有的岛或孔洞,其高度都是完全一致的,都等于 9.5 \AA . 我们知道, Bi_2Se_3 的晶格常数 $c = 28.63 \text{ \AA}$,而 Bi_2Se_3 的原胞包含 Se-Bi-Se-Bi-Se 五原子层单元 (quintuple layer, QL),这样可以得到一个 QL 的厚度为 9.5 \AA . 这说明, Bi_2Se_3 的生长是以 Se-Bi-Se-Bi-Se 五原子层为单元进行的. 这种特殊的生长模式为随后的大量工作所验证,它也适用于 Bi_2Te_3 单晶薄膜的情况.

近两年来, Bi_2Se_3 (Bi_2Te_3) 单晶薄膜的 MBE 生长研究在世界范围内得到了广泛重视. 一些小组尝试了在不同的衬底上生长 Bi_2Se_3 (Bi_2Te_3) 单晶薄膜及原位的表面电子态观测研究. 清华大学薛其坤小组、中国科学院物理研究所的马旭村小组^[28]与日本东京大学的长谷川修司小组^[29]也都利用 MBE 方法在 Si 衬底上生长 Bi_2Se_3 薄膜,用角分辨光电子能谱观察到随薄膜厚度变化发生的表面态带隙打开的现象. 薛其坤小组还在碳化硅/石墨烯衬底和 Al_2O_3 衬底上分别制备出高平整度的 Bi_2Se_3 和 Bi_2Te_3 薄膜,并利用原位的 ARPES 和 STM 对表面态形成的驻波、表面态电子在强磁场中的朗道量子化等进行深入的观察,为确证 Dirac 型电子态的存在提供了重要证据^[9,30]. 此外, A. Richardella 等人亦在 GaAs 上获得了单晶 Bi_2Se_3 薄膜^[31]. 香港科技大学的王建农小组采用 ZnSe 为缓冲层,在 GaAs 衬底上外延 Bi_2Te_3 薄膜,并与沈顺清、张富春等人合作,对表面杂质对薄膜的电输运性质的影响进行了研究^[32].

虽然通过单晶解理的方法也可以比较容易地获得厚度小于 50 nm 甚至是几纳米的薄膜^[33],也有人通过使用化学气相沉积等方法获得 Bi_2Se_3 (Bi_2Te_3) 单晶薄片、纳米带等^[34],但这些方法都无法获得对薄膜厚度和尺寸的准确控制. 这些方法得到的适合电场调控的超薄薄膜(厚度小于 20 nm)的尺寸基本上只有微米量级,重复性也有困难. 相反,使用成熟的 MBE 技术可以实现厚度均一的大面积薄膜,非常有利于基本物性研究及器件应用. 特别需要指出的是,MBE 方法生长的多种半导体材料异质结构中的载流子迁移率,远远超过相应的体材料及化学方法制备的低维材料,因此我们期待,经过努力,利用 MBE 有可能大大提高拓扑绝缘体薄膜的晶体质量.

3 拓扑绝缘体输运研究

电子输运性质的测量在基础物理的研究以及器件工作中都起着非常重要的作用. 历史上, 电输运的研究在诸如整数和分数量子霍尔效应、量子自旋霍尔效应以及近年来的研究热点石墨烯器件等领域都扮演了主导的角色. 在角分辨光电子能谱 (ARPES) 得到充分发展之前 (2000 年前), 输运测量还是了解固体的能带结构的主要手段之一. 但在拓扑绝缘体研究的早期, 表面原位探测手段如 ARPES, STM 等却起到了主要的作用. 这主要是因为早期的拓扑绝缘体样品体内导电, 从而很难分辨出真正的表面态电子输运性质. 随着样品质量的提高和表面态调控 (如栅电压调节) 手段的发展, 拓扑绝缘体的输运的研究也逐步取得进展.

3.1 单晶样品中的量子振荡

将一个三维固体材料置于磁场中, 当材料的载流子迁移率足够高时, 材料的磁电阻会随磁场的倒数 $1/B$ 呈周期振荡, 这就是 SdH 振荡. 类似地, 材料的磁矩随磁场的倒数 $1/B$ 的周期振荡称为 dHvA (de Haas-van Alphen) 效应. 它们都来源于强磁场作用下固体内电子形成分立的朗道能级. 振荡的频率可以表示成 Onsager 关系: $F = \frac{1}{\Delta(1/B)} = \frac{\hbar^2}{2\pi e} A_{\text{FS}}$, 其中 A_{FS} 为垂直磁场 B 的费米面截面的极值面积. 因此, 变化磁场并测量 SdH 振荡, 就可以推知相应的费米面的信息. 对于二维电子体系 (2DES), SdH 振荡只与垂直于电子体系所在平面的磁场 B_{\perp} 有关. 因此, 观察倾斜磁场中 SdH 振荡的规律可以将二维体系的信号与体振荡信号区分开来.

早在上世纪 70 年代, Köehler 等人就详尽地研究过 Bi_2Se_3 与 Bi_2Te_3 体材料的输运性质和量子振荡. 尽管当时并没有拓扑绝缘体的概念, 但一些结果至今仍有很好的借鉴意义^[35-39]. 在近年来的拓扑绝缘体研究中, 最早报道二维量子振荡的实验是 Taskin 和 Ando 等人报道的 $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ 合金中的 dHvA 振荡^[40]. 但由于其表面电子结构复杂, $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ 体系在研究和应用上价值有限, 人们更为关注的是 Bi_2Se_3 (Bi_2Te_3) 类第二代三维拓扑绝缘体上的量子振荡行为. Bi_2Se_3 (Bi_2Te_3) 单晶体材料的 SdH 振荡的观察并不困难, 然而, 得到并确认来自其表面态电子的二维量子振荡则要困难得多. 至今关于表面态的二维量子振荡的报道仍寥寥无几, 并

仍有待进一步确证. 尽管人们在努力提高拓扑绝缘体单晶的质量, 例如 Butch 等人将 Bi_2Se_3 单晶的电子浓度降低到 10^{16}cm^{-3} , 迁移率提高到 $2 \times 10^4 \text{cm}^2/\text{Vs}$, 但他们在输运测量中只观察到了来自体内的量子振荡^[41]. 他们推断, 由于表面不平整以及暴露在空气中的原因, 可造成的散射使得表面态的电子迁移率小于体电子.

首先观察到第二代拓扑绝缘体表面量子振荡的是斯坦福加速器实验室的 Fisher 小组. 他们在 Bi_2Se_3 中掺入大量 Sb 制备 $\text{Bi}_x\text{Sb}_{2-x}\text{Se}_3$, 将体材料的载流子浓度降低到 $\sim 10^{16} \text{cm}^{-3}$ 量级^[16]. 在超高强度的磁场 (55 T) 条件下, 观察到样品随磁场的垂直分量的倒数 $1/B_{\perp}$ 振荡的磁阻. 同时, 他们发现样品长时间暴露大气后, 该信号将大为减弱乃至消失, 因此推断振荡信号来自于表面电子. 值得注意的是, 由 SdH 振荡温度依赖关系得出的表面电子有效质量为 $0.11m_e$, 这与体材料导带的电子有效质量 $0.12m_e$ 十分接近^[37]. 而最近 Bianchi 等人利用 ARPES 观察到 Bi_2Se_3 表面附近由于能带向下弯曲形成量子阱态, 这些量子阱态具有抛物色散关系并且拓扑平庸^[42]. 人们有理由怀疑这些表面量子阱态是否在量子振荡的测量中产生影响.

随后在 Bi_2Te_3 单晶样品中, 多个小组报道观察到了二维量子振荡. 例如普林斯顿大学 Ong 小组在低温和倾斜磁场中测量了电阻率在 $4-12 \text{m}\Omega \cdot \text{cm}$ 的 Bi_2Te_3 单晶样品, 并认为其观察到的 SdH 振荡来源于表面^[43]. 加州大学的 Xiu 等人使用化学方法合成的 Bi_2Te_3 纳米带, 测得了二维量子振荡, 并利用 SiO_2/Si 背栅对 SdH 振荡进行栅电压调控. 当栅电压从 20 V 变化到 80 V 时, 观察到有效质量从 $0.11m_e$ 增加到 $0.13m_e$ ^[44]. 这个变化趋势与栅电压变化时 Dirac 电子的费米面的变化趋势相一致.

由于最近日本大阪大学的安藤阳一小组制备出了高电阻的 $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$ 单晶材料, 使得关于量子振荡的观察得到了更多的进展. 他们针对所合成的单晶的测量表明, 在低温下输运已经进入变程跃迁 (variable range hopping) 区间. 而倾斜磁场的实验也证明量子振荡的信号来自于表面^[17]. 普林斯顿大学的 Ong 小组对电阻率为 $6 \Omega \cdot \text{cm}$ 的 $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$ 单晶进行了测量, 也得到了来自表面的量子振荡的有力证据^[18].

3.2 拓扑绝缘体纳米带中的相干现象

在低温下, 电子的波函数可以在经历多次弹性散射之后仍保持相干性. 1981 年, Altshuler,

Aronov和Spivak (AAS)研究了在相同路径上沿着相反方向运动的电子的相干问题. 如果该闭合路径中有一个磁通量 Φ , 则根据 Aharonov 和 Bohm 在 1959 年的工作, 这两个路径之间的相位差是 $4\pi\Phi/\Phi_0$, 其中 $\Phi_0 = h/e$ 是磁通量子. AAS 提出, 当磁场变化时, 电子会以 $h/2e$ 为周期发生增强干涉^[45]. 这种 AAS 振荡很快在镀 Mg 玻璃纤维上得到了证实^[46], 之后更在碳纳米管中也观察到该现象^[47]. 而在拓扑绝缘体中, 如果表面的电导确实是与体电导分离的话, 在线状的拓扑绝缘体中也应当观察到类似的 AAS 振荡, 这是探测拓扑绝缘体表面运输的一个很好的手段. 这方面的最早的实验报道来自斯坦福大学的崔屹研究组, 他们在 Bi_2Se_3 纳米带中观察到磁阻振荡, 但令人惊讶的是, 振荡的周期是 h/e 而非 $h/2e$ ^[48], 其中的原因目前尚不得而知. 理论上有人提出了两个模型试图对此作出解释, 但这两个模型得到的以 h/e 为周期的振荡的极大值都出现在磁通为 $h/2e$ 的奇数倍处, 而非实验上观察到的偶数倍处^[49,50]. 最近, 南京大学的王广厚研究组在 Bi_2Te_3 纳米带中同时观察到了周期为 $h/2e$ 与 h/e 的振荡, 通过观察不同条件下两种振荡的相对强度的变化, 证明两种振荡具有不同的起源. 他们的证据表明, $h/2e$ 周期的振荡来自于表面态电子的 AAS 振荡. 值得注意的是, 他们推测表面电子的相干长度达到几个微米的量级, 可以与石墨烯中的电子相干长度比拟. 这或许能反映拓扑表面态的自旋-动量锁定带来的抑制背散射的效果^[51].

从理论上讲, 由于拓扑绝缘体的表面态电子具有自旋和动量锁定的特征^[1-4], 电子沿一个闭合路径运动一周时自旋会旋转 2π , 这样它的波函数会增加一个相因子 π , 即所谓的 Berry 相位. 直接的结果就是两个相反路径上的电子的波函数会发生相消干涉, 因此磁场为零时电导处于最大值. 与早期的 AAS 实验相似, 在拓扑绝缘体纳米带测量中, 由于系综平均的效果, 会导致 h/e 周期被抑制^[52]. 因此实验上观察到的 h/e 周期的具体机理有待于更深入的实验研究. 此外, 观察到具有理论预言特征的 $h/2e$ 振荡也许具有重要意义, 但这要求对表面的化学势和表面的无序强度进行更为细致的调控.

3.3 MBE 生长的拓扑绝缘体薄膜的栅电压调控

随着更多的研究组采用 MBE 方法获得单晶拓扑绝缘体薄膜, 利用 MBE 生长的薄膜进行输运性质研究的工作也得到了开展. 但迄今为止得到的所有不掺杂薄膜都表现出 n 型导电性. 由霍尔效应测

得的二维电子浓度在 $1 \times 10^{13} - 10 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ 范围^[53-55]. 而根据 ARPES 测量的结果推算, Bi_2Se_3 薄膜的上下两个表面的表面态所能容纳的电子数最多也就 $0.5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ 个(考虑费米能级达到导带底的情况)^[7,56]. 这说明, 大多数样品中存在显著的体电子. 另外, 实验获得的非线性的霍尔电阻曲线也表明, 材料中有多种载流子共存(见图 3). 考虑薄膜具有上下两个表面以及中间的体相, 可以认为薄膜中存在 3 个导电通道(上、下表面和体).

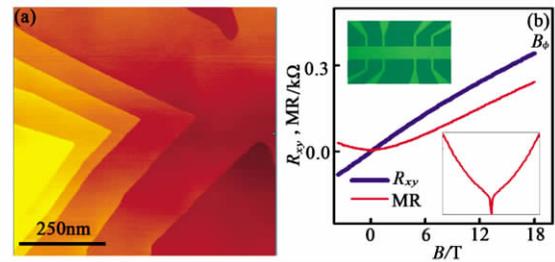


图 3 (a) 在 STO 表面上使用 MBE 外延获得的原子级平整的单晶 Bi_2Se_3 薄膜的典型形貌(膜厚 30nm); (b) STO 上的 Bi_2Se_3 薄膜未加栅电压调控时获得的典型磁阻(MR)和霍尔电阻(R_{xy})曲线(左上角插图显示我们制作的霍尔器件的光学显微镜照片, 右下角图显示零磁场附近 $\pm 3\text{T}$ 范围的磁阻曲线放大图)

前面提到, 薄膜材料与体材料相比, 一个重要优势是可以使用栅电压来调节费米能级的位置. 栅电压调控可以有顶栅和背栅两种. 考虑到许多实验要求在拓扑绝缘体上制备超导、铁磁等其他材料的低维结构, 因而使用背栅极调控上表面的化学势更为有利, 而这需要在绝缘的衬底上生长拓扑绝缘体薄膜. Si 衬底虽然在低温下绝缘, 但其击穿电场强度很低, 无法用其实现有效地栅电压调节. 我们选择钛酸锶 SrTiO_3 (简称为 STO) 作为衬底, 它具有很高的介电强度^[57,58], 这对于在输运测量时实现栅电压调控极为有利. 图 3 显示了我们在 SrTiO_3 (111) 衬底上生长的典型薄膜的形貌和输运特性曲线^[59-61].

图 4(b) 显示我们在 10nm 厚度的 Bi_2Se_3 薄膜中测得的不同栅电压下, 薄膜的霍尔电阻 (R_{xy}) 随磁场的变化曲线. 在这个样品中, 我们获得了很高的载流子调节范围. 当栅电压从 +50V 变化到 -86V 时, R_{xy} 增加了将近 1 个量级, 对应于电子浓度从 $3 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ 变化到 $0.3 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$. 在更低的电压 (-105V 附近), 磁阻率 ρ_{xx} 达到最大值, 增加了近一个量级. 根据这些特征可以推断, 在 ρ_{xx} 的最大值附近, 薄膜中应该出现了一定数量的空穴. 我们看到, 当电压降低到 -86V 以下时(图 4(b) 上方), R_{xy} 曲线出现了显著的非线性, 而且 R_{xy} 出现了反号.

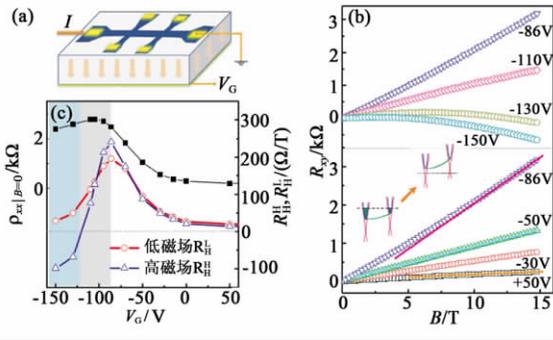


图4 (a)栅电压调控的霍尔器件的示意图；(b) 10nm厚度的Bi₂Se₃薄膜在不同栅电压下的霍尔电阻(R_{xy})随磁场的变化曲线；(c)零磁场下，磁阻率ρ_{xx}(实心方块)以及霍尔系数dR_{xy}/dB在高磁场(16–18T)R_H^H(空心三角形)以及低磁场R_H^L(空心圆)下的偏压依赖关系

由于薄膜具有一定的厚度，栅电压造成的能带弯曲对上、下表面的影响是不同的。当背栅加负电压时，薄膜的下表面的费米能级首先被拉低，并随着电压的进一步增加向价带移动。当电压足够大，使下表面的费米能级降到Dirac点之下时，下表面会出现空穴。由此我们可以认为，通过栅电压的调节，我们已经将下表面调节至Dirac点以下。但是，由于我们还没有观察到霍尔系数的极小值(虽然有指向极小值的迹象)，上表面应该仍然处于Dirac点之上。

尽管Checkelsky等人利用SiO₂/Si衬底，在解理获得的Bi₂Se₃薄膜中观察到了类似的栅电压调节效应^[62]，但他们获得的电阻率增强及载流子浓度的变化幅度远低于我们在STO衬底上获得的结果。利用背栅调节，我们在一些样品中获得了超过h/e²的最大(二维)电阻率，说明体电导在负偏压条件下能得到很大程度的抑制。

3.4 栅压调控薄膜的磁阻和反弱局域效应

前面我们提到，由于拓扑绝缘体的表面态电子具有自旋和动量锁定的特征，其结果就是时间反演对称的两个相反的闭合路径上的电子的波函数会发生相消干涉。这使得表面电子的背散射受到抑制，从而导致其特征性的“反弱局域化”(weak anti-localization)输运现象。通过测量磁场下的输运，可以观察反弱局域效应；由于施加垂直磁场将破坏时间反演对称性而增加磁阻，故磁阻在零磁场下有一个极小值。磁致电导率可以表示为以下方程：

$$\Delta\sigma(B) \cong \alpha \cdot \frac{e^2}{\pi h} \left[\Psi\left(\frac{1}{2} + \frac{B_\phi}{B}\right) - \ln\left(\frac{B_\phi}{B}\right) \right],$$

其中Ψ为digamma函数，B_φ=h/(4Deτ_φ)为与电子退相干时间τ_φ相关的特征场，D为扩散常数。常数α对

于拓扑绝缘体的一个表面取值为1/2。这个方程也适用于具有很强自旋轨道耦合的普通二维电子体系(取α=1/2)，例如Au, Pt, Bi等重金属薄膜^[63,64]。

对于不同衬底上获得的Bi₂Se₃和Bi₂Te₃薄膜，在不加负栅极偏压的情况下，其费米能级基本上处于导带之中。我们最近的研究显示，二维浓度在一个很宽范围(0.8×10¹³–8.6×10¹³cm⁻²)内的样品的磁电导都可用上述公式描述，并且拟合获得的系数α接近1/2。这个结果可以有二个可能的解释。其一是体电子与表面电子存在很强的散射，导致所有的导电通道都混合为一个导电通道。另一个解释是，样品中虽然存在3个导电通道，但或许其中某个通道的退相干长度远大于其他通道，以致于该通道在量子输运中占据了主导地位。如果我们考虑拓扑绝缘体薄膜具有上下2个表面，它们的电子输运是独立的并基本上是等价的，则应该得到α=1的结果。最近我们利用调控能力强的Bi₂Se₃样品获得了这种类型的输运^[61]。

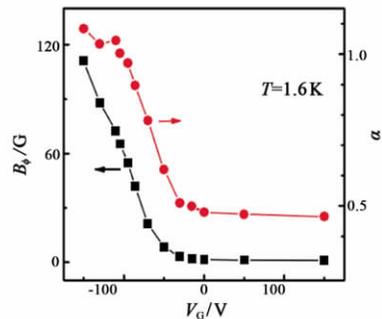


图5 拟合获得的系数α随偏压的变化(当偏压由正变负并超过-50V时α发生从1/2到1的变化)

如图5所示，样品的反弱局域特征随栅极电压显著改变，特别是在较大负偏压时。当未施加栅压(电子浓度高)时，α接近1/2，而当调节栅电压使得体电导得到显著抑制(V<-50V)时，我们得到α拟合值开始从1/2向1转变。这说明，当体电导被抑制时，上下两个表面的输运通道脱离耦合。所以可以说，在这个区间中观察到的反弱局域输运性质主要反映了表面的输运特征。

对于在低介电常数衬底上生长的拓扑绝缘体薄膜，或者通过对单晶材料进行解理得到的薄膜，利用顶栅进行调控也是一个可行的方案。最近美国马里兰州的Fuhrer小组在超薄(<10nm)Bi₂Se₃薄膜表面制作顶栅进行电场调控，也观察到薄膜的n型到p型的转变^[65]。美国麻省理工学院(MIT)的Steinberg等人采用顶栅调控的办法，也观察到Bi₂Se₃薄膜中的输运通道分离的现象^[66]。

4 存在的问题

拓扑绝缘体的研究普遍遇到的一个难题是表面暴露大气后的退化现象. 虽说理论上拓扑绝缘体的表面态是强健的, 只要有表面它就存在. 但暴露大气却可能带来表面氧化、吸附水等而导致表面化学势的变化, 从而引起表面掺杂效应而引入载流子^[67]. 另外, 表面的粗糙化也会造成表面态在空间中的弥散, 以及表面电子迁移率的降低. 当前对这个问题还没有太好的解决办法. 虽说在超高真空中进行原位的表征可以避免退化问题, 但将来总归是希望实现拓扑绝缘体的器件应用, 那么表面退化就是一个绕不过去的问题. 或许, 从表面转向界面结构是将来解决这个问题一个途径.

虽然人们已经在单晶样品上观察到了量子振荡并将其来源归于表面, 但遗憾的是, 至今所有使用 MBE 方法获得的单晶拓扑绝缘体薄膜上都没有观察到 SdH 振荡. 虽然几个小组获得的 Bi_2Se_3 薄膜的最好迁移率已经达到 10^3 以上, 但也没有观察到振荡的迹象^[60,68]. 相反, 在解理薄膜和化学气相沉积(CVD)生长的纳米线中观察到了 SdH 振荡. 这说明用 MBE 生长拓扑绝缘体薄膜的质量还有待进一步提高.

随着栅电压调控能力的提高, 人们有希望实现拓扑绝缘体的费米能级的精确定位以及表面和体输运的分离. 目前还存在的问题是: 由于使用单个栅调节的时候, 会在薄膜垂直方向上诱导出一个不对称的能带弯曲, 造成上、下表面费米能级在能带中的位置不同. 为了解决这个问题, 同时对薄膜进行顶栅和背栅的调节, 从而实现对薄膜上、下表面的费米能级的独立调控, 这也许是必要的.

5 结束语

拓扑绝缘体的出现, 为凝聚态物理注入了一股新的活力. 拓扑绝缘体与之前的研究热点石墨烯有许多类似的地方, 但拓扑绝缘体的可调控的手段及其复杂性远远超过石墨烯, 这也给基础研究和应用提供了一个更广阔的平台. 在本文讨论的范围之外还有许多令人感兴趣的课题, 例如磁掺杂、异质结构、拓扑绝缘体人工纳米结构、新型拓扑绝缘体等也都十分吸引人. 可以想见, 这是一个会持续很久、并不断产生新发现的领域.

参考文献

- [1] Kane C L, Mele E J. *Phys. Rev. Lett.*, 2005, 95: 146802
- [2] Bernivig B A *et al.* *Science*, 2006, 314: 1757
- [3] Konig M *et al.* *Science*, 2007, 318: 766
- [4] Zhang H J *et al.* *Nature Phys.*, 2009, 5: 438
- [5] Hsieh D *et al.* *Science*, 2009, 323: 919
- [6] Chen Y L *et al.* *Science*, 2009, 325: 178
- [7] Xia Y *et al.* *Nature Phys.*, 2009, 5: 398
- [8] Chen Y L *et al.* *Science*, 2010, 329: 659
- [9] Zhang T *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2009, 103: 266803
- [10] Seo J *et al.* *Nature*, 2010, 466: 343
- [11] Cheng P *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2010, 105: 076801
- [12] Hanaguri T *et al.* *Phys. Rev. B*, 2010, 82: 081305(R)
- [13] Akhmerov A R *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2009, 102: 216404
- [14] Qi X L *et al.* *Science*, 2009, 323: 5918
- [15] Yu R *et al.* *Science*, 2010, 329: 61
- [16] Analytis J G *et al.* *Nature Phys.*, 2010, 6: 960
- [17] Ren Z *et al.* *Phys. Rev. B*, 2010, 82: 241306(R)
- [18] Xiong J *et al.* *arXiv*:1101.1315, 2011
- [19] Moore J. *Nature Phys.*, 2009, 5: 378
- [20] Torane A P *et al.* *Mater. Res. Bull.*, 2001, 36: 1915
- [21] Nkum R K *et al.* *Mater. Sci. Eng. B*, 1998, 55: 102
- [22] Sankapal B R *et al.* *Mater. Chem. Phys.*, 2000, 63: 230
- [23] Nataraj D *et al.* *Cryst. Res. Technol.*, 2000, 35: 1087
- [24] John K J *et al.* *Solid State Commun.*, 1993, 85: 879
- [25] Waters J *et al.* *J. Mater. Sci. : Mater. Electron.*, 2003, 14: 599
- [26] Augustine S *et al.* *Mater. Res. Bull.*, 2005, 40: 1314
- [27] Zhang G H *et al.* *Appl. Phys. Lett.*, 2009, 95: 053114
- [28] Zhang Y *et al.* *Nature Phys.*, 2010, 6: 584
- [29] Sakamoto Y *et al.* *Phys. Rev. B*, 2010, 81: 165432
- [30] Song C L *et al.* *Appl. Phys. Lett.*, 2010, 97: 143118
- [31] Richardella A *et al.* *Appl. Phys. Lett.*, 2010, 97: 262104
- [32] He H T *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2011, 106: 166805
- [33] Hong S S *et al.* *Nano Lett.*, 2010, 10: 3118
- [34] Kong D S *et al.* *Nano Lett.*, 2010, 10: 329
- [35] Köehler H. *Phys. Stat. Sol. B*, 1973, 58: 91
- [36] Köehler H. *Solid State Commun.*, 1973, 13: 1585
- [37] Köehler H, Wuechner E. *Phys. Stat. Sol. B*, 1975, 67: 665
- [38] Köehler H. *Phys. Stat. Sol. B*, 1976, 73: 95
- [39] Köehler H. *Phys. Stat. Sol. B*, 1976, 75: 127
- [40] Taskin A A, Ando Y. *Phys. Rev. B*, 2009, 80: 085303
- [41] Butch N P *et al.* *Phys. Rev. B*, 2010, 81: 241301
- [42] Bianchi M *et al.* *Nature Commun.*, 2010, 1: 128
- [43] Qu D X, Hor Y S, Xiong J *et al.* *Science*, 2010, 329: 821
- [44] Xiu F *et al.* *Nat. Nano.* doi:10.1038/nnano.2011.19
- [45] Altshuler B L, Aronov A G, Spivak B Z. *JETP Lett.*, 1981, 33: 94
- [46] Sharvin D Y, Sharvin Y V. *JETP Lett.*, 1981, 34: 272
- [47] Bachtold A *et al.* *Nature(London)*, 1999, 397: 673
- [48] Peng H L *et al.* *Nature Mater.*, 2010, 9: 225
- [49] Bardarson J H *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2010, 105: 156803
- [50] Zhang Y, Vishwanath A. *Phys. Rev. Lett.*, 2010, 105: 206601

- [51] Qin Y Y *et al.* arXiv:1012.0104 fm. 201002667
- [52] Ihn T. *Nature Mater.*, 2010, 9:187 [61] Chen J *et al.* *Phys. Rev. B*, 2011, 83:241304(R)
- [53] He H T *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2011, 106:166805 [62] Checkelsky J G *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2011, 106:196801
- [54] Liu M H *et al.* *Phys. Rev. B*, 2011, 83:165440 [63] Bergmann G. *Phys. Rep.*, 1984, 107:1
- [55] Wang J *et al.* arXiv:1012.0271 [64] Kallaher R L, Heremans J J. *Phys. Rev. B*, 2009, 79:075322
- [56] Analytis J G *et al.* *Phys. Rev. B*, 2010, 81:205407 [65] Kim D *et al.* arxiv:1105.1410
- [57] Neville R C *et al.* *J. Appl. Phys.*, 1972, 43:2124 [66] Steinberg H *et al.* arXiv:1104.1404
- [58] Caviglia D *et al.* *Nature*, 2008, 456:624 [67] Analytis J *et al.* *Phys. Rev. B*, 2010, 81:205407
- [59] Chen J *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2010, 105:176602 [68] Li H D *et al.* *New J. Phys.*, 2010, 12:103038
- [60] Zhang G H *et al.* *Adv. Func. Mater.*, 2011, DOI:10.1002/ad-

• 物理新闻和动态 •

地幔矿石的超塑性

超塑性是指某些材料在加热时可将自身的长度拉伸几倍左右。在地球地幔中的矿石一般是不能忍受这样的拉伸长度，但最近日本 Tokyo 大学的 Takebiko Hiraga 教授和日本国家新材料研究所的 Hidehiro Yoshida 教授所领导的研究组已找到了直接的证据，证明地幔矿石都应是超塑性的。它们的特性与其他真实的或预期的可塑性材料一样是一种多晶聚集结构。研究组将一些纳米大小的粉末烧结成两类相似的地幔矿石，这两种地幔矿石大部分是由镁橄榄石 (Mg_2SiO_4) 所组成。在没有形变时，一个超塑性材料通常是由纳米大小的颗粒成分所组成，其中散布着少量更小一些的颗粒成分。当材料在加热条件下发生形变时，大颗粒与小颗粒成分都会与其周围的颗粒产生融合生长。这个反应保证了相邻的颗粒成分能继续连接，但却不能形成一个整块的镁橄榄石。分析样品结果显示，材料是由 90% 的镁橄榄石 (Mg_2SiO_4) 和 10% 的方镁石 (MgO) 所组成，它们能承受高于 500% 的形变。此外，两种电子诊断仪器，一种是反向散射衍射仪 (electron back-scattered diffraction)，另一种是透射电子显微镜 (transmission electron microscopy)，它们都显示在地幔矿石中的颗粒结构与已知的超塑性材料中的颗粒结构是相似的，从而证明地幔矿石在一定温度与形变下可以具有超塑性。研究组估计，这种超塑性可以帮助地球地幔内一块 200km 厚的板层用 6000 万年的时间在地球内穿透 3000km。

(云中客 摘自 *Nature*, 2010, 468:1091)

大质量伙伴反转热木星

至今已发现 550 多颗太阳系外的行星。其中许多是所谓的热木星，因为这些行星的质量与木星相近，轨道与它们的主恒星非常靠近。但是天文学家们不明白为什么这些外行星的四分之一都绕着与它们恒星的自旋反方向的轨道运行。这与我们的太阳系不同，太阳系中的行星都绕着与太阳自旋相同的方向做轨道转动。

美国 Northwestern 大学的天文学家们建立了一个太阳系的物理模型：一个类似太阳的恒星被远处的一个像木星那样大小的行星和更远处的大质量的物体 (行星或棕矮星) 所环绕。当这个模型运行时，物体间的引力相互作用开始改变里面的那颗行星的轨道。这种极小的引力微扰在成百上千万年间使轨道发生的微小的变化逐渐积累起来，最终使里面这颗行星的轨道由近乎圆形 (类似我们太阳系的木星) 改变成细长的椭圆形，运行过程中有时会非常接近其主恒星。恒星的引力会使该行星受到挤压和加热，使其轨道运动能量减少，轨道收缩。这一情况以前曾有人模拟过。

Northwestern 大学的研究者在模拟中发现了新的现象：这种引力微扰还会引起轨道倾角的变化。倾角是恒星自旋角动量与行星轨道角动量之间的夹角。在有些情况下，热木星太过于倾向其恒星，以致发生翻转，并绕着另一个方向运行。

这里关键的物理量是角动量。角动量是守恒量，当内部的行星由圆形的轨道变成椭圆形轨道时，其角动量急剧减少，反过来使外部的行星的角动量增加同样大小的数量。内部行星轨道角动量的减少使它非常容易发生翻转。有关论文发表在 *Nature* 2011 年第 473 卷第 187—189 页上。

(树华 编译自 *Physics World News*, 12 May 2011)

拓扑绝缘体表面态的 STM 研究*

程 鹏^{1,†} 张 童^{1,2} 何 珂² 陈 曦¹ 马旭村² 薛其坤^{1,2}

(1 清华大学物理系 低维量子物理国家重点实验室 北京 100084)

(2 中国科学院物理研究所 表面物理国家重点实验室 北京 100190)

摘 要 文章主要介绍了利用扫描隧道显微镜对拓扑绝缘体表面态进行的一系列研究工作,包括拓扑绝缘体表面态的电子驻波以及拓扑表面态的朗道量子化现象.这些工作对于拓扑绝缘体基本性质的确立以及深入理解具有十分重要的意义.

关键词 拓扑绝缘体,电子驻波,朗道量子化

Scanning tunneling microscope studies of topological insulators

CHENG Peng^{1,†} ZHANG Tong^{1,2} HE Ke² CHEN Xi¹ MA Xu-Cun² XUE Qi-Kun^{1,2}

(1 State Key Laboratory of Low-Dimensional Quantum Physics and Department of Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

(2 State Key Laboratory for Surface Physics, Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

Abstract We summarize recent scanning tunneling microscope studies of topological insulators, including the observation of electron standing waves and the Landau quantization of topological surface states. These works have contributed greatly to our understanding of topological insulators.

Keywords topological insulators, electron standing waves, Landau quantization

三维拓扑绝缘体是具有导电的并受时间反演对称性保护的表面态,而其体态则是绝缘性的.在动量空间中,表面态具有狄拉克锥(Dirac cone)结构(见图1).三维拓扑绝缘体的带隙中只能存在奇数个狄拉克锥.狄拉克锥的顶点称为狄拉克点.狄拉克点附近的电子态的能量与动量之间满足线性的色散关系,由狄拉克方程描述.狄拉克锥上的每一点只存在一个自旋态,其自旋指向形成螺旋结构(见图1).从2007年开始,一系列三维拓扑绝缘体在理论上和实验上被预言和发现^[1-7].

目前研究最多的三种三维拓扑绝缘体材料是 Bi_2Te_3 , Bi_2Se_3 和 Sb_2Te_3 . 这一类拓扑绝缘体材料有着独特的优势:(1)晶体结构简单,有确定的化学配比,易于合成;(2)能带结构简单,在带隙内只存在一个狄拉克点,从而为理论及实验研究提供了一个最理想的模型;(3)这类材料体能隙都比较大,特别是 Bi_2Se_3 的能隙可以达到 0.3 eV,为发展自旋电子学器件创造了可能.实验上研究拓扑绝缘体的手段主要有角分辨光电子能谱(ARPES)、扫描隧道显微

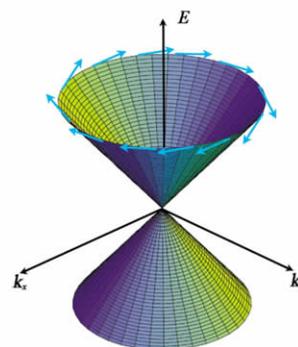


图1 三维拓扑绝缘体中的狄拉克锥

镜(STM)和输运测量.本文将主要介绍 STM 方面的工作.

STM 基于量子力学中的隧道效应,通过对针尖与样品之间的隧道电流的测量和控制,可以获得达到原子分辨的样品表面的形貌信息.更重要的是,它

* 国家自然科学基金(批准号:10721404)、科技部量子调控重大研究计划(批准号:2009CB929400)资助项目

2011-06-13 收到

† 通讯联系人. Email:cheng-p07@mails.tsinghua.edu.cn

能在原子尺度上探测空间局域电子态密度(LDOS),称为扫描隧道谱技术(scanning tunneling spectroscopy, STS).它可以用于分析包括金属、半导体、超导体等材料的局域态密度,获得更加丰富的电子态分布信息.一些研究组相继开展了对拓扑绝缘体表面态的STM研究,并取得了重要进展.这些研究对于理解拓扑绝缘体的性质具有不可或缺的作用.

1 拓扑绝缘体表面态的电子驻波

固体中电子能量为 ϵ 的本征态由 Bloch 波 $\Psi_k(r)$ 表示, k 为波矢. 函数 $\epsilon(k)$ 称为色散关系, 可以通过 ARPES 获得. 与 ARPES 相比, STM 可以在实空间对样品表面进行原子级成像, 但不能给出材料在倒易空间的信息. 然而如果在样品表面引入杂质或者缺陷, 它将导致准粒子发生弹性散射, 从而将同一等能面上不同波矢的本征态相互联系起来. 如果入射波的波矢为 k_i , 经过弹性散射之后变为波矢 k_f , 它们之间的动量改变为 $q = k_f - k_i$. 在 LDOS 上表现为波长 $\lambda = 2\pi|q|$ 的周期性振荡. 这一现象在 STM 的 dI/dV 成像中将显示为像水的波纹一样的驻波图样. 通过测量不同能量下准粒子驻波的波长大小, 再结合式 $\lambda = 2\pi|q|$ 与 $q = k_f - k_i$, 即可得到准粒子色散关系的一些信息.

电子驻波最早由 IBM 的 D. M. Eigler 小组在 Cu 单晶表面上观察到^[8], 随后又在 Au, Ag 等贵金属、Be(0001) 以及半导体 InAs 等表面观察到. 实际上, 这种表面干涉现象不仅适用于电子, 同样也适用于其他的表面准粒子, 包括超导体中的波戈留波夫准粒子等等. 最早曾在普通超导金属 Nb 表面观察到了准粒子受表面杂质散射形成的驻波, 之后在高温超导体表面也观察到了同样的准粒子干涉条纹. 通过傅里叶变换, 可以直观地获得表面电子驻波所具有的周期性, 也就是在倒易空间中波矢 q 的大小和方向, 从而得到电子的能带色散关系的一些信息. 如今, 这一技术已被广泛地应用于高温超导、单层石墨烯等这样一些新奇量子材料当中, 并从中分析出有关费米面形状、色散关系以及一些特殊的散射过程等非常丰富的物理信息.

对于拓扑绝缘体来说, 它的表面态电子是自旋极化的狄拉克费米子, 且受时间反演对称性所保护. 这些性质都会体现在表面态电子的散射过程中, 并可以通过电子驻波进行研究.

我们以 Si(111) 为衬底, 通过采用二元半导体化合物生长中经典的三温度法, 利用分子束外延方法(MBE)制备出高质量的 Bi_2Te_3 薄膜^[9]. 然后通过测量 STS 谱, 获得了 Bi_2Te_3 薄膜表面的局域态密度, 观察到了与样品偏压近似呈线性关系的电子态密度, 这代表了表面态的贡献. 在样品表面低温沉积少量的 Ag 原子之后, 单个 Ag 原子在 Bi_2Te_3 薄膜表面呈现出类似三聚体的结构, 据推测, 这是由单个 Ag 原子替换了第二原子层的 Bi 原子所形成的. 利用 dI/dV 成像技术对包含有 Ag 原子的区域进行扫描, 在扫描的同时记录下某一偏压下每一个像素点的 dI/dV 值, 得到的图像即可反映该能量处态密度的空间分布. 图 2(a)–(f) 就是在 Ag 原子周围区域所作的不同偏压下的 dI/dV mapping 图像, 可以看到围绕于 Ag 原子周围的电子干涉条纹, 即表面电子驻波. 电子驻波的出现, 证明了 Bi_2Te_3 薄膜二维表面态的存在. 虽说体态电子也能产生干涉, 但由于体态的三维能带结构, 不同波矢的电子驻波相互交叠在一起, 很难观察到清晰的电子干涉条纹. 只有表面态电子的干涉才能产生清晰的电子驻波, 并与偏压具有确定的变化关系. 这是继 ARPES 之后对拓扑绝缘体表面态存在的又一个有力证明.

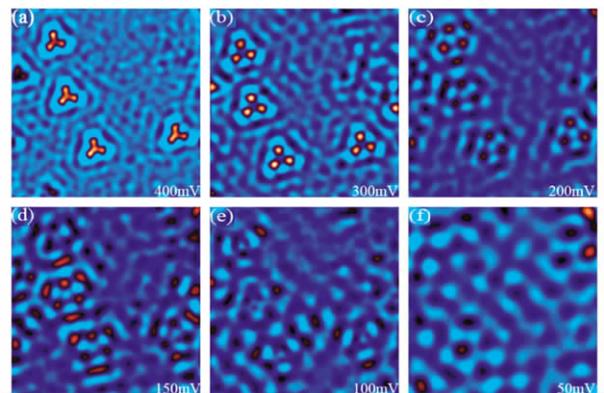


图 2 图 2 (a)–(f) Ag 原子附近区域在不同偏压下的 dI/dV 图像(扫描面积为 $28\text{nm} \times 28\text{nm}$, 图像分辨率为 128×128 , 扫描电流为 0.1nA)

为了定量地研究表面电子驻波的波长与能量的关系, 需要将图 2 中一系列的 dI/dV mapping 图像进行傅里叶变换(见图 3), 可以发现, 每幅傅里叶变换图像都显示出围绕布里渊区的中心 Γ 点的 6 个互相对称的亮点, 且每个亮点都位于 $\bar{\Gamma}-\bar{M}$ 方向上, 而 $\bar{\Gamma}-\bar{K}$ 方向则几乎看不到亮度.

为了解释傅里叶变换的图样, 需要研究电子驻波形成的机制. 在动量空间中, k_i 和 k_f 都处于一个等能面上. 各种初动量到末动量的散射都会发生, 但

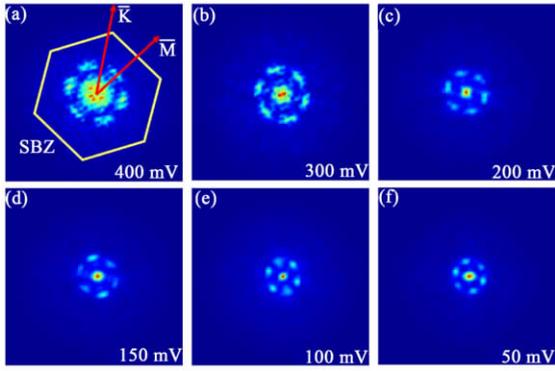


图3 (a)–(f)为各能量下的 dI/dV mapping 图像分别对应的傅里叶变换(其中(a)中的黄线标出了根据原子分辨定出的表面布里渊区(SBZ),红线表示的分别为 k 空间中的 $\bar{\Gamma}-\bar{M}$ 和 $\bar{\Gamma}-\bar{K}$ 方向.见《物理》网刊彩图)

并不是所有的散射形成的驻波都能看到,绝大部分的驻波由于相消干涉而不会出现.真正能够出现在驻波中的散射的动量转移 q 必须为极值,这类似于光学中的费马定律. Bi_2Te_3 拓扑表面态的等能面如图4所示.使 q 取极值的散射有两种,其动量转移分别为 q_1 和 q_2 , q_1 沿 $\bar{\Gamma}-\bar{K}$ 方向,而 q_2 沿 $\bar{\Gamma}-\bar{M}$ 方向.

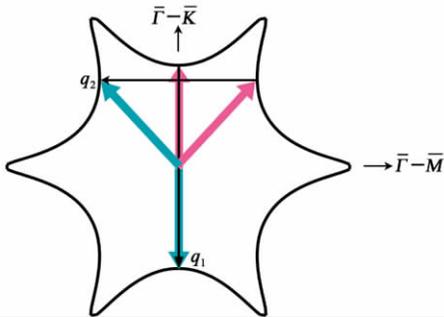


图4 散射过程示意图(散射主要发生在不同的 $\bar{\Gamma}-\bar{K}$ 方向之间, q_1 和 q_2 是两个可能的散射波矢)

沿 $\bar{\Gamma}-\bar{K}$ 方向的 q_1 正是入射波 k_i 所对应的背散射动量转移,但 q_1 并没有出现在傅里叶变换的图样中.这一现象正是由 Bi_2Te_3 特有的拓扑表面态造成的.三维拓扑绝缘体的表面态是有自旋手性的,动量相反的态其自旋方向也是相反的.而自旋相反且动量相反的两个态可以用时间反演算符直接关联起来,也就是 $|-k \downarrow\rangle = T|k \uparrow\rangle$,其中 \hat{T} 为时间反演算符.对于费米子,满足 $\hat{T}^2 = -1$. Ag 原子是非磁性的,它所引起的散射势 \hat{U} 是时间反演不变的,也就是说: $\hat{T}\hat{U}\hat{T}^{-1} = \hat{U}$.于是有:

$$\begin{aligned} \langle -k \downarrow | \hat{U} | k \uparrow \rangle &= -\langle k \uparrow | \hat{U} | k \downarrow \rangle^* \\ &= -\langle -k \downarrow | \hat{U} | k \uparrow \rangle = 0, \end{aligned}$$

即动量相反且自旋相反的电子态之间的散射几率为零.所以说,背散射 q_1 的缺失是时间反演对称性的

结果,这是拓扑表面态的特定性质^[10].

普林斯顿大学的 Yazdani 研究组报道了他们对 $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ 合金 ($0.07 < x < 0.22$) 的表面态进行的 STM 研究结果^[11],也发现了背散射被禁戒的现象. $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ 合金 ($0.07 < x < 0.22$) 是先于 Bi_2Te_3 被提出的一种三维强拓扑绝缘体材料,其表面态由 5 个狄拉克锥组成.对 $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ 合金进行 dI/dV mapping 图像扫描,同样发现存在着表面态电子干涉条纹.为了提高信号强度,获得更精细的散射结构,他们并不是将 dI/dV mapping 图像直接进行傅里叶变换,而是利用所谓的 FT-STM 技术,将互为相反的偏压下的 dI/dV mapping 图像逐个像素点相除,得到: $Z(\mathbf{r}, E=eV) = g(\mathbf{r}, +V)/g(\mathbf{r}, -V)$,然后再将该比值进行傅里叶变换,得到倒易空间中的 $Z(\mathbf{q}, E=eV)$.把它与 ARPES 给出的等能面图像相比较,发现 $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ 合金的表面态电子存在 8 种不同方向的散射矢量,但是唯独缺少背散射矢量.与前面介绍的 Bi_2Te_3 表面的电子驻波所不同的是,这些散射矢量是在不同的狄拉克锥之间散射形成的,而 Bi_2Te_3 表面的电子驻波是单个狄拉克锥内的散射.

除此之外,斯坦福大学的 Kapitulnik 研究组在 Sn 掺杂和 Cd 掺杂的单晶 Bi_2Te_3 样品表面的台阶边缘处同样观察到了清晰的电子驻波^[12].从分析驻波的振幅随距离的衰减关系也得出了背散射缺失的结论,并且验证了其表面态等能面的六角雪花状结构.

上述实验都是在不含杂质或者包含非磁性杂质的拓扑绝缘体表面进行的.理论预言,在拓扑绝缘体中引入磁性杂质,能破坏拓扑绝缘体表面态的时间反演对称性,从而观察到在非磁性杂质周围所缺失的背散射.最近,波士顿学院的 Madhavan 研究组对 Fe 掺杂的 Bi_2Te_3 单晶材料表面进行 STM 研究,取得了新的进展^[13].他们同样通过 dI/dV mapping 图像观察到了拓扑绝缘体表面态的电子驻波.进行傅里叶变换之后发现,在能量高于 150meV 时,占主导地位散射矢量仍然集中于 $\bar{\Gamma}-\bar{M}$ 方向,与之前的报道是一致的.然而在较低的能量范围内,却发现其中包含了新的散射通道.通过与 ARPES 获得的能带结构相对比,该散射通道正是 $\bar{\Gamma}-\bar{K}$ 方向电子的背散射所形成的散射矢量.

2 拓扑绝缘体表面态的朗道量子化

磁场下分立朗道能级的出现不仅是二维电子体系的重要特征,也是产生量子霍尔效应的根源.在均

匀磁场下,二维自由电子气将形成一系列等间隔的分立能级,称为朗道能级.对于狄拉克费米子,其哈密顿量表示为 $H = -\hbar v_F \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma}$, 其中 $\mathbf{k} = -i \nabla = -i \left(x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y} \right)$, v_F 表示费米速度, $\boldsymbol{\sigma}$ 是 Pauli 矩阵, $\boldsymbol{\sigma} = \sigma_x \mathbf{x} + \sigma_y \mathbf{y} + \sigma_z \mathbf{z}$. 在均匀磁场 B 下,狄拉克费米子同样形成一系列分立能级,所不同的是,这些能级不再是等间隔的,而是由 $E_n = \text{sgn}(n) \sqrt{2|n| \hbar e B v_F^2}$, $n=0, \pm 1, \pm 2 \dots$ 给出(见图 5). 当 $n=0$ 时, $E=0$, 也就是说,在狄拉克点处存在一个朗道能级.

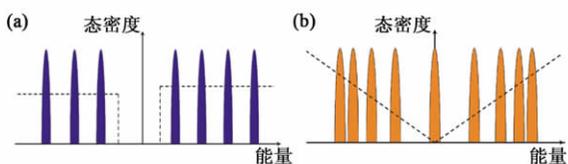


图 5 (a) 二维自由电子气的朗道能级; (b) 二维狄拉克费米子的朗道能级(其中虚线分别表示二者在零磁场下的态密度)

利用 STS 获得朗道能级峰最早是 1998 年由汉堡大学的 Wiesendanger 研究组在 $n\text{-InAs}(110)$ 表面上实现的^[14]. 2005 年, 东京大学的 Fukuyama 研究组在高定向热解石墨(HOPG)上观察到了朗道能级峰^[15], 并且利用 dI/dV mapping 图像的方法观察到了局域态与扩展态并存的状态, 为之前在 HOPG 上测得的量子霍尔效应提供了又一个直接证据. 之后, 罗格斯大学的 Andrei 研究组又在 HOPG 表面发现了两种不同的朗道能级峰相互叠加的现象, 分别由无质量的狄拉克费米子与有质量的准粒子产生, 并把这一现象归因于 HOPG 材料不同的堆垛方式^[16]. 在 2004 年石墨烯被发现之后, 人们又开始寻求狄拉克费米子体系中的朗道能级. 2009 年, 美国国家标准局的 Strocio 研究组利用 STS 在 SiC 外延生长的单层石墨烯表面成功地观察到了非常敏锐与清晰的朗道能级峰^[17], 一方面非常精确地验证了其具有 $E_n \propto \sqrt{|n|B}$ 的线性关系, 证明了单层石墨烯内狄拉克费米子的存在, 另一方面也证实了单层石墨烯内的电子迁移率很高的特性. 拓扑绝缘体的表面态同样具有狄拉克费米子的线性色散关系, 因此利用 STM/STS 技术, 我们期望同样可以获得类似于石墨烯的朗道能级.

我们仍然采用了 MBE 的生长办法, 以 SiC 上外延生长的石墨烯做衬底制备出了高质量的 Bi_2Se_3 薄膜^[18,19], 然后利用 STM/STS 对在垂直于样品表面的磁场作用下的 Bi_2Se_3 薄膜进行了研究^[20], 发现

原本在零磁场下平滑的 STS 谱上叠加上了一系列分立的电导峰, 这正是量子的朗道能级峰. 图 6(a) 是朗道能级与磁场之间的变化关系. 在较高的磁场下, 可以清晰地看到 10 个以上的朗道能级峰, 相邻峰之间的间距随能量增加而逐渐减小, 这一点与一般二维自由电子气的等间距的朗道能级完全不同, 而是与石墨烯的朗道能级相类似. 在不同的磁场下, 狄拉克点处始终有一个不随磁场变化的电导峰, 称为零级朗道峰. 以上这些特点都与之前提到的狄拉克费米子的朗道能级所具备的特征相吻合. 将不同磁场下各个朗道能级峰进行高斯拟合, 精确定出它们分别对应的能量值, 然后以能量为纵坐标, \sqrt{nB} 为横坐标, 得到能量值与 \sqrt{nB} 的关系. 朗道能级在费米面附近与 \sqrt{nB} 基本满足线性关系, 但是在远离费米面的地方却偏离直线关系. 这种偏离主要来源于针尖诱导的电荷效应, 这一效应经常出现于载流子密度较低的半导体中. 由 MBE 生长的 Bi_2Se_3 薄膜缺陷密度很小, 费米面位于带隙之内, 其表面载流子密度很低, 大约在 10^{12}cm^{-2} 量级. 因此, 在外电场下的屏蔽和感应电子主要由表面态提供. 将针尖与样品形成的隧道结抽象为平板电容器模型, 当针尖与样品之间的偏压为 V , 距离为 d 时, 形成的静电场为 V/d , 这一静电场将使得样品表面产生诱导电荷, 其电荷密度可粗略表示为 $\epsilon_0 V/d$. 若 $V \sim 100 \text{mV}$, $d \sim 1 \text{nm}$, 那么诱导电荷密度为 10^{12}cm^{-2} 量级, 与表面本征的载流子密度相当. 因此电荷感应效应对拓扑绝缘体的 STS 测量结果有很大影响. 它使得朗道能级相对于费米面整体向下移动. 在费米面附近, 由于偏压很小, 这一效应并不明显, 而远离费米面时, 偏压越大, 诱导电荷越多, 这一效应就越明显. 对每一个朗道能级峰进行修正, 以去除掉针尖诱导的电荷效应, 得到本征的朗道能级峰的位置, 能量值与 \sqrt{nB} 满足很好的线性关系(见图 6(b)). 通过直线的斜率可定出 $v_F = 3.4 \times 10^5 \text{m/s}$. 朗道能级与 \sqrt{nB} 的正比关系有力地证明了 Bi_2Se_3 薄膜的表面态具有线性狄拉克费米子的能带色散关系, 同时, 零级朗道能级的存在为半整数量子霍尔效应的出现提供了实验依据.

狄拉克点以下并没有出现任何朗道能级峰, 这一点与石墨烯的朗道能级有所不同. 根据 ARPES 的实验结果, 认为这是因为测量样品的狄拉克点接近于价带, 其下方的表面态与价带重叠, 因此影响了狄拉克点以下的朗道能级的观察.

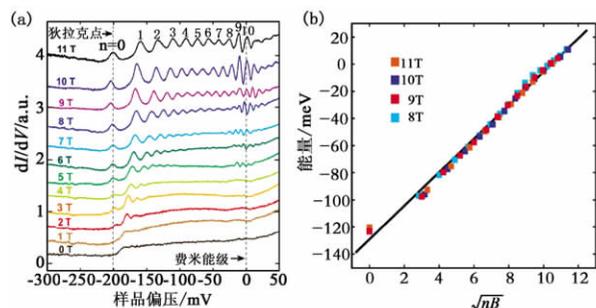


图6 (a) Bi₂Se₃ 薄膜的朗道能级随磁场的变化; (b) 经过修正之后的朗道能级与 \sqrt{nB} 基本成线性关系

二维电子的朗道能级对于表面缺陷散射十分敏感. 利用低温蒸镀的办法在 Bi₂Se₃ 表面沉积少量的 Ag 原子, 以观察其对朗道能级的抑制作用. 当 Ag 原子密度很低时, 如图 7(a) 所示, 11 T 磁场下的朗道能级的强度基本上没有变化. 逐渐增加 Ag 原子密度 (见图 7(b)), 可以看出朗道能级明显变弱, 只有狄拉克点附近和费米面附近的峰可以分辨出来. 将 Ag 原子密度增至更大时, 朗道能级几乎被完全抑制 (见图 7(c)). 当杂质间的距离与电子在磁场中的回旋半径可比拟时, 杂质散射开始起到明显作用. Bi₂Se₃ 薄膜表面的 Ag 杂质原子对朗道能级的抑制从另一个角度证明了朗道能级是由表面态产生的.

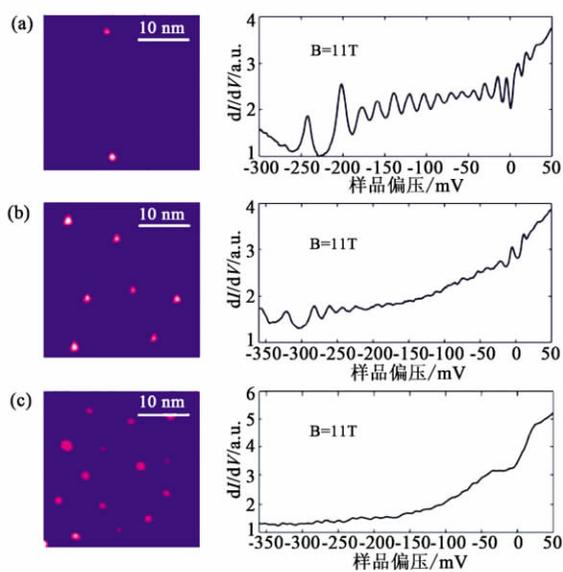


图7 Bi₂Se₃ 薄膜表面不同覆盖度的 Ag 原子对朗道能级的抑制

与此同时, 日本的 Hanaguri 研究组报道了在拓扑绝缘体 Bi₂Se₃ 上观察到的朗道量子化. 他们所采用的样品是利用高温熔融的办法获得的 Bi₂Se₃

单晶材料, 在真空中解理之后进行低温强磁场下的 STS 测量. 他们在体材料上得到的朗道能级峰与在 Bi₂Se₃ 薄膜上测得的结果是十分类似的^[21].

3 展望

拓扑绝缘体的基本性质已经得到了根本确立, 并且获得了广泛认可. 但是, 拓扑绝缘体的独特魅力远不止于此, 理论物理学家们预言了一系列更加奇妙的物理现象, 例如表面态的量子反常霍尔效应、拓扑磁电效应和磁单极、Majorana 费米子与拓扑超导体等, 这些会对未来科学的发展具有重大的推动意义, 并有可能导致信息技术的革命. STM 在探索这些新奇量子现象中将会继续发挥重要的作用.

参考文献

[1] Fu L, Kane C L. Phys. Rev. B, 2007, 76: 045302
 [2] Hsieh D, Qian D, Wray L *et al.* Nature, 2008, 452: 970
 [3] Hsieh D, Xia Y, Wray L *et al.* Science, 2009, 323: 919
 [4] Zhang H J, Liu C X, Qi X L *et al.* Nat. Phys. , 2009, 5: 438
 [5] Moore J. Nat. Phys. , 2009, 5: 378
 [6] Xia Y, Qian D, Hsieh D *et al.* Nat. Phys. , 2009, 5: 398
 [7] Chen Y L, Analytis J G, Chu J H. Science, 2009, 325: 178
 [8] Crommie M F, Lutz C P, Eigler D M. Nature, 1993, 363: 524
 [9] Li Y Y, Wang G, Zhu X G *et al.* Adv. Mater. , 2010, 22: 4002
 [10] Zhang T, Cheng P, Chen X *et al.* Phys. Rev. Lett. , 2009, 103: 266803
 [11] Roushan P, Seo J, Parker C V *et al.* Nature, 2009, 460: 1106
 [12] Alpichshev Z, Analytis J G, Chu J H *et al.* Phys. Rev. Lett. , 2010, 104: 016401
 [13] Okada Y, Dhita C, Zhou W W *et al.* Phys. Rev. Lett. , 2011, 106: 206805
 [14] Dombrowski R, Wittneven Chr, Morgenstern M *et al.* Appl. Phys. A, 1998, 66: S203
 [15] Matsui T, Kambara H, Niimi Y *et al.* Phys. Rev. Lett. , 2005, 94: 226403
 [16] Li G H, Andrei E Y. Nat. Phys. , 2007, 3: 623
 [17] Miller D L, Kubista K D, Rutter G M *et al.* Science, 2009, 324: 924
 [18] Song C L, Wang Y L, Jiang Y P *et al.* Appl. Phys. Lett. , 2010, 97: 143118
 [19] Zhang Y, He K, Chang C Z *et al.* Nat. Phys. , 2010, 6: 584
 [20] Cheng P, Song C L, Zhang T *et al.* Phys. Rev. Lett. , 2010, 105: 076801
 [21] Hanaguri T, Igarashi K, Kawamura M *et al.* Phys. Rev. B, 2010, 82: 081305

二维拓扑绝缘体退相干效应研究*

江 华^{1,†} 成淑光² 孙庆丰³ 谢心澄^{1,4}

(1 北京大学国际量子材料科学中心 北京 100871)

(2 西北大学物理系 西安 710069)

(3 中国科学院物理研究所 北京 100190)

(4 美国奥克拉荷马州立大学物理系 奥克拉荷马州 74078)

摘 要 拓扑绝缘体是当前凝聚态物理研究的热点. 退相干效应对该体系的影响的研究不仅有重要的理论意义, 而且也是实现未来量子器件的不可或缺的前期工作. 文章作者从理论上研究了退相干对二维拓扑绝缘体特别是量子自旋霍尔效应的影响. 研究结果表明, 作为量子自旋霍尔效应的标志的量子化纵向电阻平台对不破坏自旋记忆的退相干效应(普通退相干)不敏感, 但却对破坏自旋记忆的退相干效应(自旋退相干)非常敏感. 因此, 该量子化平台只能在尺寸小于自旋退相干长度的介观样品中存在, 从而解释了量子自旋霍尔效应实验中所观测到的结果(见 *Science*, 2007, 318:766). 同时, 文章作者还定义了一个新的物理量, 即自旋霍尔电阻, 并发现该自旋霍尔电阻也有量子化平台. 特别是该量子化平台对两种类型的退相干都不敏感. 这说明在宏观样品中也能观测到自旋霍尔电阻的量子化平台, 因此更能全面地反映量子自旋霍尔效应的拓扑特性.

关键词 拓扑绝缘体, 量子自旋霍尔效应, 退相干

Two-dimensional dephasing effects in topological insulators

JIANG Hua^{1,†} CHENG Shu-Guang² SUN Qing-Feng³ XIE Xin-Cheng^{1,4}

(1 International Center for Quantum Materials, Peking University, Beijing 100871, China)

(2 Department of Physics, Northwest University, Xian 710069, China)

(3 Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

(4 Department of Physics, Oklahoma State University, Stillwater, Oklahoma 74078, USA)

Abstract Topological insulator is one of the most attractive areas in condensed matter physics in recent years. The study of the dephasing effect in such systems has important theoretical meanings and meanwhile, is inevitable for the realization of future quantum devices. In our studies of the influence of dephasing on the two-dimensional topological insulator, especially the quantum spin Hall effect, we find that the quantized longitudinal resistance plateaus are robust against normal dephasing but fragile to spin dephasing. Thus, these quantized plateaus can only survive in mesoscopic samples in which the spin coherence length is smaller than the sample size. Our results are in excellent agreement with experiments (*Science*, 2007, 318:766). In addition, we define a new spin Hall resistance that also exhibits quantum plateaus, which are robust against both normal and spin dephasings. These novel quantum plateaus can thus survive in macroscopic samples and better reflect the topological nature of the quantum spin Hall effect.

Keywords topological insulator, quantum spin Hall effect, dephasing

1 拓扑绝缘体与退相干效应简介

拓扑绝缘体及其相关物理现象是当前凝聚态物

* 国家自然科学基金(批准号:10734110;10974236)、中国博士后基金(批准号:20100480147)资助项目

2011-05-06 收到

† 通讯联系人. Email:jianghua05@pku.edu.cn

理中的一个研究热点,无论在基础物理研究还是无能耗自旋电子器件设计方面它都具有举足轻重的地位^[1,2].拓朴绝缘体完全不能用传统的“绝缘体”来描述;而要用一种全新的量子物质态来描述.它的体电子态是有能隙的绝缘态;而它的表面(对三维体系)或者边缘(对二维体系)电子态则是无能隙的金属态.这种表面金属态的出现完全是由材料体电子态的数学拓朴结构(拓朴序)决定.由于拓朴绝缘态的拓朴序需要使用拓朴不变量来表征,这些拓朴不变量是离散的整数或分数,它们不能连续地改变.因此拓朴绝缘体的表面金属态与表面的具体结构无关,它能非常稳定地存在,不受体系中的缺陷和杂质等的影响.

强磁场引起的量子霍尔效应是最早发现的拓朴绝缘体体系^[3].在该体系中,霍尔电阻表现出不受外界干扰所影响的量子化平台.它的发现对现代物理学产生了深远的影响,并且有2次共4人因此而获得诺贝尔物理学奖.近几年来,人们陆续预言并在实验中证实了几种二维或三维材料能形成全新的拓朴绝缘态^[4-8].这类拓朴绝缘态是由材料自身的强自旋轨道耦合结合特殊的能带结构而产生的,是材料的内在性质的反映.由于它不需要外加磁场,因此能保持体系的时间反演对称性.不同于由第一类Chern数来表征的量子霍尔效应拓朴体系^[9],这类拓朴绝缘态的拓朴序使用 Z_2 拓朴数^[10]来表征.量子自旋霍尔效应是该类拓朴绝缘态在二维情况下的表现形式.在量子自旋霍尔效应体系中,强自旋轨道耦合会使得体能带打开一个带隙,并在带隙内建立起螺旋(helical)边缘态能带.这一独特的能带结构,保证了当样品化学势位于体带隙中时,载流子只能沿着边界传输,而且对于同一边界来说,不同自旋的载流子的传输方向完全相反.这种边缘态输运方式使得量子自旋霍尔效应体系的霍尔电阻为零,而纵向电阻却表现出量子化平台.量子自旋霍尔效应最早是在单层石墨烯样品中提出的,随后很快被推广到其他二维和三维体系^[1,2].特别是张首晟组预言了在合适宽度的HgTe/CdTe半导体量子阱中会形成能带倒置结构,从而量子自旋霍尔效应能在该体系中出现^[5].随后,他们的理论预测被德国的实验组所证实.在实验中,他们测量了纵向电阻,并在零磁场下的介观样品中观测到量子化的纵向电阻平台,从而间接证实了量子自旋霍尔效应及其拓朴性质^[6].尽管如此,该量子化平台仅仅出现在介观尺度样品中;当样品尺度变大时,尽管平台属性还能够保持,但是其值已经远远偏离了量子化值.与之相对应

的量子霍尔效应,它的量子化霍尔电阻平台能够在宏观尺度很好保持.在考察了各种因素之后,我们提出退相干可能会破坏量子自旋霍尔效应纵向电阻的量子化平台.

在实际材料中,存在着各种各样的能导致波函数相位随机化(波函数相位随机化称为退相干)的非弹性散射机制,它们大致可以分为两类:在第一类中,载流子仅仅丢失相位记忆而保留自旋记忆,如电子-电子相互作用,电-声子相互作用等等导致的退相干过程都属于这一类,它们被称为普通退相干;在另一类中,载流子不仅仅丢失相位记忆,而且丢失自旋记忆,如由磁性杂质引起的自旋翻转的退相干过程,核自旋涨落导致的退相干过程等属于这一类,它们被称为自旋退相干.在理论上,可以通过Büttiker虚拟导线的方法来模拟这些退相干过程^[11].该方法的关键是在具有退相干的区域接上虚拟导线.载流子从退相干区域流进虚拟导线,丢失相位记忆后再回到退相干区域.在整个过程中,虚拟导线中的静电流为零,而体系的相位相干则被破坏.

2 物理模型和研究方法

最近,我们研究了退相干对量子自旋霍尔效应的影响^[12].我们的研究集中在以下两个问题:(1)体系中的退相干是如何影响实验上所观测到的量子化纵向电导平台;(2)是否存在新的可观测物理量,它们能够在宏观尺度的样品中,依然保持量子化平台的特性,从而能更好地反映量子自旋霍尔效应的本质.为了与实验结果进行对比,我们考虑与实验装置相同的六端口体系(见图1(a)),体系哈密顿量 H 可以写为

$$H = H_{\text{QSHE}} + H_{\text{virtual-lead}} + H_{\text{couple}},$$

其中 H_{QSHE} 为量子自旋霍尔效应样品的哈密顿量. H_{QSHE} 的表述形式并不唯一,它和所选用的计算模型有关.选用的模型可以是最简单的理想模型^[12],也可以是具体材料模型,例如,铁磁的石墨烯模型^[13],HgTe/CdTe量子阱模型^[14].无论选用哪种模型,本文的主要计算结果都完全相同.为了方便,下文只给出HgTe/CdTe量子阱模型的计算结果. $H_{\text{virtual-lead}}$ 为Büttiker虚拟导线的哈密顿量,为了模拟退相干,退相干区域每个格点都需要接上与轨道数相同的虚拟导线. H_{couple} 为虚拟导线与量子自旋霍尔体系的耦合项.

利用Landauer-Büttiker电流公式结合非平衡

格林函数方法,我们可以计算每根实导线和虚拟导线上的电流(具体计算公式见文献[12]).然后我们分析这些导线的端口条件.图1(a)中的1和4端口为电压端,我们在这两端口加上一小电压 V ,从而导致在纵向有一电流 I_{14} .对于普通退相干,载流子在进入虚拟导线并从虚拟导线返回的过程中,仅仅丢失相位记忆而保留自旋记忆.因此,任何一个格点 i 的虚拟导线电流均满足 $J_{i\uparrow} = J_{i\downarrow} = 0$,这时 $V_{i\uparrow}$ 一般不等于 $V_{i\downarrow}$.对于自旋退相干,我们通过使每根虚拟导线满足 $V_{i\uparrow} = V_{i\downarrow}, J_{i\uparrow} + J_{i\downarrow} = 0$,来达到载流子既丢失相位记忆,也丢失自旋记忆的要求.如果横向4个端口作为电压探测端,端口条件满足总电流为零,即 $J_{p\uparrow} + J_{p\downarrow} = 0$,并且自旋压 $V_{p\uparrow} = V_{p\downarrow} = V_p (p=2,3,5,6)$.这时就可以定义纵向电阻 $R_{14,23} = \frac{V_2 - V_3}{I_{14}}$,该纵向电阻与文献[6]中实验测量的纵向电阻完全相同.我们也考虑了横向4个端口为自旋压探测端的情形,这时每个端口的条件是 $J_{p\uparrow} = J_{p\downarrow} = 0$;在这种情况下,我们可以定义自旋霍尔电阻 $R_s = \frac{V_{p\uparrow} - V_{p\downarrow}}{I_{14}}$ (即横向任一端口的自旋压差除以纵向电流).利用Landauer-Büttiker公式,并结合各导线的端口条件,就可以得到每根实导线上的电压与电流,然后纵向电阻 $R_{14,23}$ 和自旋霍尔电阻 R_s 也可获得.

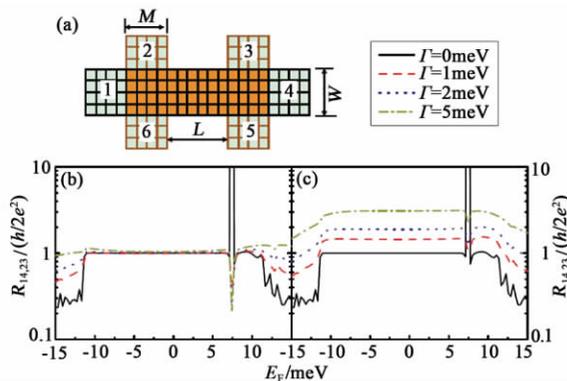


图1 (a)是一个六端的自旋霍尔装置的示意图;(b)和(c)显示纵向电阻 $R_{14,23}$ 与费米能级 E_F 的关系,不同曲线对应于不同的退相干强度 Γ (b)为普通退相干,(c)为自旋退相干.样品尺寸为 $L=200\text{nm}, W=200\text{nm}, M=200\text{nm}$.其他参数为 HgTe/CdTe 量子阱实际参数^[14],其中体带隙为 $\Delta = -20\text{meV}$

3 数值结果及讨论

我们首先研究退相干对纵向电阻的影响.图1(b)和1(c)分别给出了在普通退相干和自旋退相干情况下纵向电阻 $R_{14,23}$ 随着费米能 E_F 的变化关系.在没

有退相干的情况下,纵向电阻表现出量子化平台.当有退相干存在时,量子化平台是否能保持还与退相干类型有关:对于普通退相干, $R_{14,23}$ 的平台能够很好保持,即使在很大的退相干强度 Γ 下,平台值改变也很小(见图1(b)),基本维持在量子化平台值 $\frac{h}{2e^2}$ 上;但对于自旋退相干,尽管 $R_{14,23}$ 还能保持平台的样子,但它的平台值大大偏离了量子化平台值 $\frac{h}{2e^2}$,即便在自旋退相干 Γ 很小的情况下,这个偏离量也非常大.我们分析了这个现象背后的物理机制:对普通退相干来说,载流子保持了自旋记忆,背散射仅仅发生在载流子从样品的一条边界散射到与此样品边界相对的另一边界时.因此除非样品非常窄,通常情况下的背散射都非常弱,从而使量子化平台能够很好地保持;但对自旋退相干来说,载流子的自旋可以翻转,背散射可以在样品的同一条边界发生,所以纵向电阻 $R_{14,23}$ 受到剧烈影响并严重偏离量子化平台值.在一个真实的实验体系中,因为磁性杂质、核自旋涨落等存在,自旋退相干就会不可避免地发生.当样品尺寸大于自旋退相干长度时,自旋退相干对输运性质的影响将不能被忽略,因此量子化纵向电阻平台只能在介观样品中存在.这就解释了为什么在实验中对于宏观样品总观测不到量子化的纵向电阻平台.而且,通过数值模拟,我们还可以定量地获得实验上所观测到的纵向电阻 $R_{14,23}$ 的所有特性.

下面我们研究在量子自旋霍尔效应体系中是否有比纵向电阻 $R_{14,23}$ 更能很好反映其拓扑性质的物理量.首先我们比较量子霍尔效应与量子自旋霍尔效应的输运测量结果.在量子霍尔效应六端口输运测量中,霍尔电阻表现出量子化平台,该量子化平台几乎不受任何散射和任何退相干的影响^[15].在量子自旋霍尔效应中,每条边上的自旋电压差类似于霍尔电压,如果我们定义自旋霍尔电阻 $R_s = \frac{V_{p\uparrow} - V_{p\downarrow}}{I_{14}}$,它的物理性质应当类似于量子霍尔效应中的霍尔电阻.图2(b)和图2(c)描述自旋霍尔电阻 R_s 在两种退相干情况下随着费米能级 E_F 的变化.无论是自旋退相干还是普通退相干, R_s 都会表现出量子化的平台.例如,当 $E=0$ 和 $\Gamma=5\text{meV}$ 时,纵向电阻 $R_{14,23}$ 的改变量超过210%(见图1(c)),而自旋霍尔电阻 R_s 在自旋退相干(见图2(c))和普通退相干(见图2(d))情况下改变量均不超过0.3%,由此我们认为, R_s 的量子化平台在很强的退相干下仍然可以保持. R_s 对各种退相干的非敏感性与量

子霍尔效应中霍尔电阻对各种退相干非敏感性的物理本质完全类似. 借助自旋压沿着某一条边缘的分布图(见图2(a)与图2(b)),我们可以得到有关 R_s 对各种退相干的非敏感性的物理本质的直观图像. 在左右导线, 自旋压为自旋不相关的, 并且有 $V_{1\sigma} = -V_{4\sigma} = V$ (σ 表示自旋向上或自旋向下); 在中心区, 自旋压 $V_{p\sigma}$ 是自旋相关的. 在没有退相干时, 自旋向上的载流子无耗散地从左往右流, 而自旋向下的载流子无耗散地从右向左流(2, 3 端口), 所以有 $V_{p\uparrow} = -V_{p\downarrow} = V$ (见图2(a)). 当体系存在自旋退相干时, 由于背散射效应, 部分原自旋压为 $V_{p\uparrow}$ 通道的载流子会被散射到自旋压为 $V_{p\downarrow}$ 的通道, 从而使得自旋压差 $V_{p\uparrow} - V_{p\downarrow}$ 减小(见图2(b)), 与此同时, 向右运动通道上的载流子被散射到相对的向左运动通道, 纵向电流 I_{14} 会相应地减小. 这种自旋压差 $V_{p\uparrow} - V_{p\downarrow}$ 与纵向电流 I_{14} 的补偿效应使得即便存在强自旋退相干情况下自旋霍尔电阻 R_s 平台还依然保持不变. R_s 对各种退相干的非敏感性意味着在宏观尺度样品中观测到量子化的 R_s 平台是可行的.

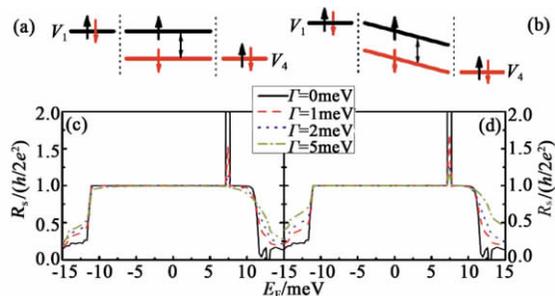


图2 (a)和(b)分别为不存在自旋退相干(a)与存在自旋退相干(b)情况下自旋压 $V_{p\sigma}$ 沿着某一条边界示意图. 黑色实线与箭头表示自旋向上, 红色实线与箭头表示自旋向下. (c)和(d)为自旋霍尔电阻 R_s 与费米能级 E_F 的关系, 其中(c)为普通退相干, (d)为自旋退相干

4 结束语

在本文中,我们研究了退相干对量子自旋霍尔效应的影响. 由于自旋退相干效应,原来理论预测的量子自旋霍尔效应的标志——纵向量子化电阻平台只在介观尺度的样品中存在,从而解释了最近量子自旋霍尔效应输运实验的测量结果. 同时,我们找到对任何退相干都不敏感的新物理量——自旋霍尔电阻. 它的量子化平台能在宏观样品中观测到,从而能更好地反映量子自旋霍尔效应的拓扑性质.

参考文献

- [1] Hansan M Z, Kane C L. Rev. Mod. Phys. ,2010,82:3045
- [2] Qi X L,Zhang S C. arXiv:1008.2026v1;Qi X L,Zhang S C. Physics Today,2010,63(1):33
- [3] Klitzing K V,Dorda G,Pepper M. Phys. Rev. Lett. ,1980,45:494
- [4] Kane C L,Mele E J. Phys. Rev. Lett. ,2005,95:226801
- [5] Bernevig B A,Hughes T L,Zhang S C. Science,2006,314:1757
- [6] Konig M,Wiedmann S *et al.* Science,2007,318:766
- [7] Fu L,Kane C L,Mele E J. Phys. Rev. Lett. ,2007,98:106803
- [8] Hsieh D,Qiao D *et al.* Nature(London),2008,452:970
- [9] Kohmoto M,Annals of Physics,1985,160:343
- [10] Kane C L,Mele E J. Phys. Rev. Lett. ,2005,95:146802
- [11] Büttiker M. Phys. Rev. B,1986,33:3020
- [12] Jiang H,Cheng S G,Sun Q F,Xie X C. Phys. Rev. Lett. ,2009,103:036803
- [13] Zhang H,Jiang H,Xie X C,Sun Q F. Phys. Rev. B,2011,83:115402
- [14] Jiang H,Wang L,Sun Q F,Xie X C. Phys. Rev. B,2009,80:165316
- [15] Edited by Datta. Chapter 4, Electronic Transport in Mesoscopic System. Cambridge, U. K.: Cambridge University Press,1995

• 读者和编者 •

轻松阅读 享受物理 ——欢迎订阅 2011 年《物理》杂志

《物理》是中国物理学会、中国科学院物理研究所主办出版的学术期刊,1972 年创刊,致力于传播当代物理学及其交叉学科的前沿新进展,促进物理学与相关学科的相互交叉和渗透,沟通科研与产业,推动中国物理学的发展.《物理》拥有众多来自科研和教学一线的优秀作者,集科学性、前沿性和可读性为一体,特色鲜明,让读者轻松掌握当前物理学各领域的最新动态,读者遍及国内各相关院所、高等学校和企业界.

《物理》每月 12 日出版发行,各地邮局均可订阅(邮发代号:2-805),邮局定价为 240 元/年.2011 年度的期刊订阅正在进行,为感谢广大读者长期以来对《物理》杂志的关爱和支持,向编辑部直接订阅《物理》杂志可享受优惠订阅价 180 元/年.

欲了解更多详情可以登录 www.wuli.ac.cn 查询,也可来电来信咨询.

咨询电话:(010)82649266;82649029

Email: physics@iphy.ac.cn

拓扑绝缘体电子态的电场调控

常 凯[†]

(中国科学院半导体研究所 半导体超晶格国家重点实验室 北京 100083)

摘 要 文章简要介绍了对拓扑绝缘体性质的电场控制,主要包括三维拓扑绝缘体表面磁性的电场控制、电子在 p-n 结中的类光输运行为以及拓扑绝缘体量子点的特性.

关键词 拓扑绝缘体, RKKY 相互作用, p-n 结, 量子点

Electrical control of electrons in topological insulators

CHANG Kai[†]

(The State Key Laboratory for Superlattices and Microstructures, Institute of Semiconductors,
Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083, China)

Abstract A brief introduction to the electrical control of magnetic and transport properties in topological insulators is presented. The paper includes: (i) electrical controllable surface magnetism in three-dimensional topological insulators; (ii) quasi-optical propagation behavior of electrons in topological insulator p-n junctions; (iii) topological insulator quantum dots.

Keywords topological insulator, RKKY interaction, p-n junction, quantum dot

1 引言

标准的教科书告诉我们,自然界中的固态物质大致分为两类:金属和绝缘体(或金属、半导体和绝缘体).绝缘体是个大家族,有普通的能带绝缘体、无序导致的安德森绝缘体、电子-电子相互作用导致的莫特绝缘体等.最近,这个家族里增添了一位新成员——拓扑绝缘体^[1,2].拓扑绝缘体是由能带的拓扑不变量 Z_2 来刻画的一类材料.这类材料中的电子态具有以下奇妙的特性:(1)本征体材料内部是绝缘体;(2)表面存在无能隙的金属态;(3)电子态的自旋和动量方向是锁定的,即螺旋性.内部绝缘而边界导电的体系早在半导体二维电子气的整数量子霍尔效应中就发现了.在霍尔沟道的内部,形成朗道能级,朗道能级之间存在正比于磁场强度的能隙.但是,霍尔沟道的边界处则存在无能隙的边缘态,这是由磁场的洛伦兹力造成的.其能带特性可以用一种拓扑不变量(TKNN 数)来刻画,因而是一种破坏时间反演对称性的拓扑绝缘体.然而,最新的研究发现,由

自旋-轨道耦合导致的不破坏时间反演对称性的拓扑绝缘体是一种新的量子物质态.当自旋轨道耦合导致体系的能带反转时,在能隙中出现无能隙的边缘态和表面态.这种物质态的实现无需外加磁场,因而其边缘态和表面态受到时间反演对称性的保护,能够抵抗无序效应和局域扰动而存在(前提是这些扰动不能破坏时间反演对称性).这类无能隙的边缘态会导致一些新奇的输运特性,如量子自旋霍尔效应.这种理论预言的输运效应已经被实验证实了^[3-5].目前人们已经发现了许多拓扑绝缘体,如 HgTe, BiSe, BiTe 等^[6-9].

自旋轨道耦合是一种由相对论效应导致的电子自旋和轨道运动之间的相互作用.对于常见的半导体材料来说,如闪锌矿结构的半导体材料 GaAs, InAs 和铅锌矿结构的材料 GaN 和 ZnO,导带的电子大多是 4s 态成分,其球状对称性导致自旋轨道耦

* 国家自然科学基金(批准号:60525405;10874175)资助项目;国家科技部量子调控项目(批准号:2011CB922204-2)

2011-06-10 收到

[†] 通讯联系人. Email: kchang@semi.ac.cn

合效应消失,但是其价带主要是 3p 态成分,因而有较强的自旋轨道耦合. 当 s 型的导带和 p 型的价带之间的能隙较小时,即两者之间的耦合较强时,导带的电子可以通过和价带电子之间的强耦合而产生自旋轨道耦合. 但是通常的半导体材料中自旋轨道耦合很弱,因而其主要物理效应是导致电子自旋的弛豫以及电场调控. 自旋轨道耦合强度由两方面的因素决定:(1)构成半导体材料的元素的原子序数;(2)导带和价带之间的能隙大小^[10]. 前者决定了原子中电子的相对论效应的强弱,因为在重原子中电子围绕核运动的速度更快,更接近光速,因而相对论效应(包括自旋轨道耦合)更强. 能隙则决定了导带和价带之间的耦合强弱. 能隙越小,则耦合越强,因此导带电子的自旋轨道耦合强度则越大. 但是常见的半导体材料的能隙较大,如 GaAs 为 1.52eV, InAs 为 0.5eV, GaN 和 ZnO 的带隙都大于 3.0eV. 由于带隙较大,因而带间耦合较弱,导致自旋轨道耦合较弱. 因此,我们应该在含有重元素的窄带隙半导体中寻找强烈的自旋轨道耦合系统. 很幸运的是,自然界为人类准备了这样的一类材料,如 HgTe, BiSe 等. 这类材料含有重元素 Hg 和 Bi,同时带隙很窄,满足以上我们提及的两个条件,因而是一种强烈的自旋轨道耦合体系. 而另一种新型的材料——石墨烯,虽然带隙为零,但是碳原子太轻,因而自旋轨道耦合效应很弱.

2 表面磁性的电控制

电子自旋的电控制是近来自旋电子学领域内人们孜孜以求的目标之一. 我们研究了三维拓扑绝缘体表面上局域自旋之间的 RKKY 相互作用(见图 1). 由于表面态电子的螺旋性,局域自旋之间的 RKKY 相互作用不仅仅有海森伯项,还可以同时存在扭曲的 DM 项和伊辛项^[11](见下面的(1)式)(值得指出的是,这种行为在自旋轨道耦合系统中也存在). 通过程函数的解析表达式可知,这三项的程函数各不相同. 有趣的是,海森伯项和伊辛项的程函数可以几乎同时为零,这导致旋磁相的出现(见图 2). 通过调整栅极电压,可以改变局域自旋之间的相互作用,实现不同的自旋模型,如各向异性的海森伯模型、XXZ 模型等. 因此,三维拓扑绝缘体的表面磁性十分丰富多彩,并可能为我们提供实现和研究各种人工强关联体系的实验平台.

$$H \frac{RKKY}{1,2} = F_1(R, \epsilon_F) S_1 \cdot S_2 + F_2(R, \epsilon_F) (S_1 \times S_2)_y + F_3(R, \epsilon_F) S_1^y S_2^y, \quad (1)$$

其中 F_1, F_2, F_3 分别是海森伯项、DM 项和伊辛项的程函数.

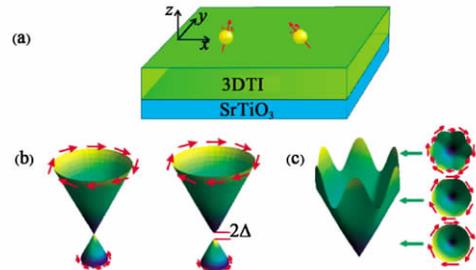


图 1 (a) 三维拓扑绝缘体(3DTI)的表面磁离子构型示意图(底部蓝色(见《物理》网刊彩图,下同)部分是底电极);(b) 表面态能带和自旋指向示意图(其中 2Δ 是磁离子极化打开的能隙);(c) 考虑能带翘曲(warping)效应的能带示意图

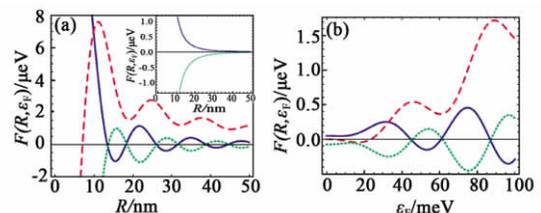


图 2 RKKY 相互作用程函数随(a)磁离子距离 R 和(b)费米能 ϵ_F 的变化(图中蓝色实线是海森伯项的程函数,红色和绿色虚线分别对应 DM 项和伊辛项的程函数. 图(a)中的插图是费米能位于 Dirac 时的程函数)

3 类光的输运行为

相似性在物理学研究中发挥着重要的作用. 通过相似性,人们可以把不同的领域联系起来,互相借用研究方法和概念. 固体中的电子波与光波都表现出相似的波动性,因而构造具有类光输运特性的电子器件一直是电子器件领域内人们探索和期待的目标. 与普通材料中电子的抛物线型的能带不同,在拓扑绝缘体和石墨烯中,表面态和边缘态的能带色散关系是线性的,这使得实现类光的电子器件成为可能. 利用栅极电压和应变,人们理论上证明可以实现电子的类光输运行为,如 Vaselago 透镜、全反射、Goos-Hachen 效应^[12]等. HgTe 二维电子气的迁移率目前仅次于 GaAs 二维电子气,这也是为什么能够在此种材料上首次观察到量子自旋霍尔效应的原因. 利用半导体中成熟的样品制备技术,我们可以实现平面的 p-n 结结构^[13,14],并通过改变栅极电压,可以在很大的范围内控制电子的布儒斯特角(见图

3), 而这对光来说, 由于材料的折射率是固定的, 因而较难于实现. 如果考虑体系中存在电场导致的 Rashba 自旋轨道耦合, 则通过恰当地调节电子入射角, 就可以完美地实现电子自旋分离器的功能, 即自旋向上的电子完美地透射, 而自旋向下的电子被全反射 (见图 3(c)). 对于较高的栅极电压, 此时可以实现带间的电子隧穿, p 型区域对电子透射的表现类似于负折射率材料. 我们相信应变也可以实现相似的类光现象, 从而实现全力学地控制电子运输.

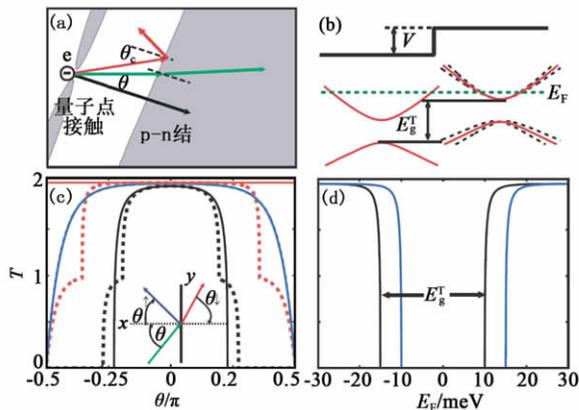


图 3 (a) HgTe 二维量子气 p-n 结示意图 (阴影部分是栅极区域, 电子从量子点接触射入 p-n 结); (b) p-n 结两侧能带图和电势构型图; (c) 电子透射率与入射角度 θ 的关系 (实线是不同栅压下的透射率, 虚线是不同栅压下存在 Rashba 自旋轨道耦合时的电子透射率); (d) 不同栅压下, 特定角度入射时, 电子透射率与费米能 E_F 的关系

4 拓扑绝缘体量子点

相比于拓扑绝缘体材料, 其纳米结构则相对研究较少, 尤其是量子点方面. 主要的原因是目前对 BiSe 等三维拓扑绝缘体的生长和制备还存在很多问题, 如样品表面的污染、微纳结构的刻蚀等. 与 BiSe 材料相比, HgTe 材料的微纳结构制备技术目前已经相当完善, 人们能够采用刻蚀的方法制备此类材料的微结构, 如量子点等 (见图 4). 利用顶栅极控制电子数目, 侧栅极控制量子点的量子限制势.

图 5 是我们计算的量子点能谱^[15]. 从图中可以看出, 对具有正带隙的量子点 ($M > 0$), 其能谱和普通的量子点类似. 但是负能隙量子点 ($M < 0$) 的能谱则完全不同. 体能隙中出现两组新的量子态, 这类量子态从价带一直延伸分布到导带, 且出现了线性的色散关系. 这类新的量子态在实空间中分布在量子点的边界附近, 与起源于体带的量子态分布完全不同.

我们从图 6 可以看出, 这些新量子态的能量和

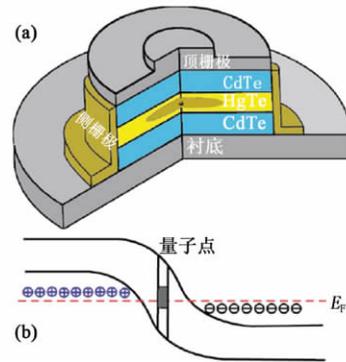


图 4 (a) 刻蚀法制备的 HgTe 量子点结构示意图; (b) 埋有 HgTe 量子点的 p-n 结结构示意图

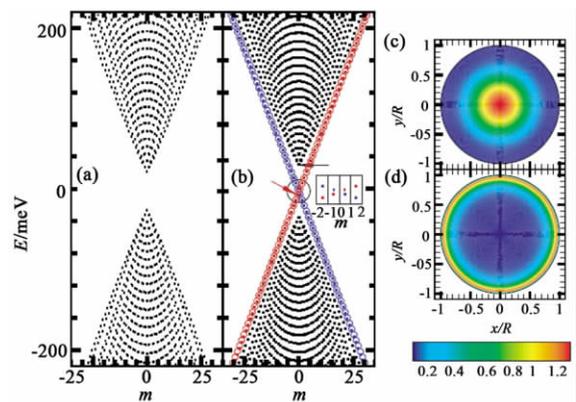


图 5 (a) 和 (b) 分别对应 HgTe 量子点的正常相和拓扑绝缘体相的能级图 (其中横坐标 m 是角动量量子数); (c) 和 (d) 分别是量子点中体内态和边缘态的几率分布图 (其中 R 是量子点半径)

量子点的半径成反比 ($\propto 1/R$), 普通的量子态则正比于 $1/R^2$. 这些特性可以理解如下: 对于普通的量子态, 它们来自于体内态的量子化, 因此正比于 $1/R^2$; 而新的量子态则起源于边缘态, 因此它们沿着量子点的边缘量子化, 所以正比于 $1/R$. 当施加外磁场时, 对于普通的量子点来说, 人们通常观察到的是量子点的磁能级, 即 Fock-Darwin 能级. 通常在这类量子点中无法观察到持续电流和 Aharonov-Bohm 振荡 (AB 振荡或 AB 效应). 而持续电流的振荡过去在量子环和 II 型量子点中已经看到过. 这是由量子环及其量子态的拓扑性质决定的. 在普通的量子点中, 电子分布在量子点中心, 因此人们从未观察到持续电流及其 AB 效应. 在拓扑绝缘体量子点中, 由于电子分布在边界附近, 呈现出环形分布, 且显示出螺旋的特征, 即顺 (逆) 时针旋转的电子自旋始终向上 (向下). 这种特征受时间反演对称性的保护表现出鲁棒性. 因此人们可以期待看到持续电流和 AB 振荡. 拓扑绝缘体量子点中持续电流的 AB 效应可以用来检测边缘态的存在. 目前测量边缘态

的实验手段主要是角分辨光电子谱(ARPES)和量子自旋霍尔效应. AB 效应可能给我们提供一种新的检测边缘态的实验方法. 更为重要的是, 由于边缘态是自旋极化且是光学暗态(见图 6(c)), 因此可以被用来构造量子信息的存储器件.

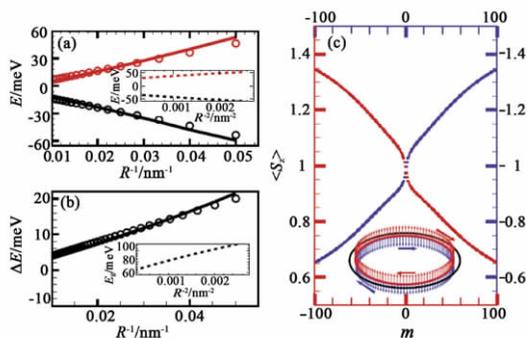


图 6 (a)量子点能级能量 E 和(b)能级差 ΔE 与量子点半径 R 的关系(图(b)中插图的纵坐标 E_g 是有效能隙); (c)边缘态电子自旋 $\langle S_z \rangle$ 与角动量量子数 m 的关系

5 结束语

拓扑绝缘体是一种神奇的新型材料,正越来越引起人们的注意. 由于其独特的能带结构和手征特性,表现出许多新奇的物性和现象. 本文主要讨论了拓扑绝缘体边缘态和表面态电子、类光输运行为、表面磁性和纳米结构量子态的电控制. 边缘态和表面态的类光输运行为为我们构造类光的电子器件提供

了物理基础. 利用栅极电压,我们可以有效地控制自旋-自旋相互作用. 其纳米结构中的边缘态所具有的光学暗态的特性,为我们构造量子信息的存储器提供了可能. 拓扑绝缘体领域无疑正在快速增长,越来越多不同研究背景的人们加入进来,人们可以期待将会有越来越多的新奇的物理现象被发现.

参考文献

[1] Qi X L, Zhang S C. Phys. Today, 2010, 63: 33
 [2] Hasan M Z, Kane C L. Rev. Mod. Phys. , 2010, 82: 3045
 [3] Kane C L, Mele E J. Phys. Rev. Lett. , 2005, 95: 146802
 [4] Bernevig B A, Hughes T L, Zhang S C. Science, 2006, 314: 1757
 [5] König M, Wiedmann S, Brüne C *et al.* Science, 2007, 318: 766
 [6] Fu L, Kane C L, Mele E J. Phys. Rev. Lett. , 2007, 98: 106803
 [7] Hsieh D, Qian D, Wray L *et al.* Nature (London), 2008, 452: 970
 [8] Chen Y L, Analytis J G, Chu J H *et al.* Science, 2009, 325: 178
 [9] Zhang H J, Liu C X, Qi X L *et al.* Nature Phys. , 2009, 5: 438
 [10] Yang W, Chang Kai. Phys. Rev. B, 2006, 74: 193314
 [11] Zhu J J, Yao D X, Zhang S C, Chang Kai. Phys. Rev. Lett. , 2011, 106: 097201
 [12] Wu Z H, Zhai F, Peeters F M, Xu H Q, Chang Kai. Phys. Rev. Lett. , 2011, 106: 176802
 [13] Zhang L B, Chang Kai, Xie X C *et al.* New J. Phys. , 2010, 12: 083058(Selected by the annual selection of IOP 2010)
 [14] Zhang L B, Cheng F, Zhai F, Chang Kai. Phys. Rev. B, 2011, 83: 081402(R)
 [15] Chang Kai, Lou W K. Phys. Rev. Lett. , 2011, 106: 206802

· 物理新闻和动态 ·

决定行人行为和拥挤灾难的简单规律

随着聚众事件的规模和发生次数的增加,对拥挤灾难的研究及人群流动的模拟成为重要的研究领域. 但是,即使那些成功的模型方法(如由牛顿力模型发展起来的方法),仍不能符合观察的结果. 由法国、瑞士和英国的科学家组成的研究组提出一种认知科学的方法,这种方法是建立在行为探索法的基础上的. 他们认为行人根据视觉获得的信息,也就是根据行人与眼前障碍物的距离,采取两种认知步骤来调整行人的行走速度和方向. 虽然这种模型比以前的模型简单,但所预言的个人行走轨迹以及集体人群的流动情况与大量的经验的和实验的数据符合得很好. 这个模型预言了自组织现象的出现,例如,自发地形成单行线或停让一下再走的现象. 此外,行人行为探索法与身体碰撞计算相结合,预言在人群密度极高时会发生混乱的拥挤现象,这种现象正是近来所发生的拥挤灾难中所观察到的. 研究人员所采用的方法是通过对多个人之间的相互作用进行积分处理,克服了物理上的一些限制,提出了“对相互作用”模型. 因此,通过认知探索法了解人群动力学不仅对于更好地安排安全的聚众事件是极为重要的,而且可以为建立更现实的描述集体社会行为的模型开辟途径. 此外,这种方法还可应用于改进自控机器人的导航.

(树华 编译自 *Proceedings of the National Academy of Science of the United States of America*, 18 April 2011)

Z_2 拓扑不变量与拓扑绝缘体*

余睿 方忠 戴希†

(中国科学院物理研究所 北京 100190)

摘要 文章回顾了两种 Z_2 拓扑数的计算方法,并详细介绍了一种用非阿贝尔贝里联络表示绝缘体 Z_2 不变量的计算方法.这种方法可以确定出一般能带绝缘体的拓扑性质,而不需要限定波函数的规范.利用这种新方法,文章作者计算了二维石墨烯(graphene)系统的 Z_2 拓扑数,得到了和以前研究相一致的结论.

关键词 非阿贝尔贝里联络, 拓扑绝缘体, Z_2 拓扑数

Z_2 topological invariant and topological insulators

YU Rui FANG Zhong DAI Xi†

(Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

Abstract We briefly review some of the equivalent ways of determining the Z_2 invariant in 2D insulators. We introduce a new expression for this invariant in band insulators using non-Abelian Berry's connection. The new expression can be used to determine the topological nature of a general band insulator in a way that does not require any gauge fixing. By this means, we have recalculated the Z_2 topological index for 2D graphene systems, and have obtained results consistent with previous studies.

Keywords non-Abelian Berry's connection, topological insulator, Z_2 topological invariant

1 引言

在上世纪 80 年代以前,人们对物质状态进行分类的主要依据是体系的对称性.朗道相变理论强调了对称性的重要性,指出凝聚态物质中对称性的破缺对应着相变的发生.对称性由序参量描述,对称性破缺意味着序参量不为零的有序相的出现.但是在发现整数量子霍尔效应(IQHE)后,人们发现这个系统从平庸态变化到整数量子霍尔态并没有对称性的变化,不存在局域序参量,对该物质态的描述需要引入拓扑不变量的概念^[1-3].具有不同的拓扑有序态的系统必须由不同的拓扑不变量来进行描述.这个概念极大地提升了人们对凝聚态物质中量子现象的认识,在凝聚态物理发展历史中具有里程碑式的重要意义.

1.1 整数量子霍尔系统

1980 年,冯·克利青在由半导体反型层所构成

的二维电子气中测量了强磁场下霍尔电阻随二维电子气中电子浓度变化的关系,发现在浓度变化的过程中,霍尔电导在一定浓度范围内保持不变,即出现霍尔电导的平台,这些平台对应的数值为 $\sigma_{xy} = ne^2/h$,这里 n 为整数.这种效应称之为整数量子霍尔效应^[4].其物理机制为:当系统的外加磁场足够强和温度足够低时,材料体内的所有电子都被局域化到了分立的朗道能级上,形成一个完全绝缘的体态.但是材料的边界上会形成一些没有“背散射”的导电通道(也就是不受杂质散射影响的理想导体),从而导致量子霍尔效应的出现.随后人们发现这个整数 n 与系统占据态在布里渊区中的拓扑性质有关^[1,2]:

$$n = \frac{1}{2\pi} \int d^2k F, \quad (1)$$

其中 $F = \nabla \times A$ 是贝里曲率, $A = i \sum_{m=1}^M \langle u_m(k) | \nabla_k |$

* 国家自然科学基金(批准号: 131212503413; 10821403)、国家重点基础研究发展计划(批准号: 2007CB925000)资助项目

2011-06-22 收到

† 通讯联系人. Email: daix@aphy. iphy. ac. cn

$u_m(k)$ 是贝里联络, M 是占据态的数目. 在数学上整数 n 被称为第一陈数. 整数量子霍尔系统的拓扑不变量就由第一陈数来表征. 从此拓扑学进入了凝聚态物理学的研究领域.

1.2 拓扑绝缘体和 Z_2 拓扑不变量

当系统存在时间反演对称性时, 系统不存在霍尔电流, 霍尔电导为零, 因此不论系统是否具有其他的拓扑性质, 第一陈数都等于零, 这样就不能用第一陈数来对具有时间反演对称性的系统进行拓扑分类. 2005年, Kane和Mele提出了用 Z_2 拓扑数来表征时间反演不变系统拓扑性质的方法^[5]. 按照他们提出的方法, 所有时间反演不变的二维绝缘体系统可以用 Z_2 数分成两类: 一类是普通绝缘体, 对应 $Z_2=0$; 另一类是拓扑绝缘体, 对应 $Z_2=1$. 图1给出了这种分类直观的解释^[6]. 这个概念还可以推广到时间反演不变的三维系统^[7-9], 这时需要用4个 Z_2 拓扑数(1个强拓扑数, 3个弱拓扑数)来描述系统的拓扑性质^[7, 10-13]. 按照这种分类方法, 三维时间反演不变绝缘体系统可以分为平庸的普通绝缘体、弱拓扑绝缘体和强拓扑绝缘体三类. 其中强拓扑绝缘体由于在所有方向的表面上都有狄拉克色散形式的表面态, 在理论和实验上都引起了广泛关注^[14-25]. 确定一个具有时间反演对称性的绝缘体系统是否具有非平庸的拓扑性质, 最直接的方法是计算系统的 Z_2 拓扑数. 因此本文的主要目的是介绍几种 Z_2 拓扑数的计算方法.

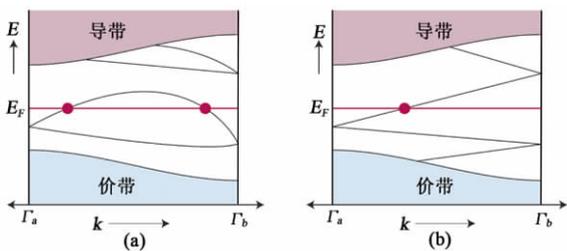


图1 (a)普通绝缘体和(b)拓扑绝缘体能带中贯穿能隙的边界态(表面态)^[6](Γ_a 和 Γ_b 是时间反演不变点, 这些点上的能级是2重简并的. 图(a)中费米面和边界态相交次数是偶数次, 在外在扰动下, 边界态可以被拉进体态中. 因此这种形式的边界态在拓扑上是不稳定的. 图(b)中费米面和边界态相交奇数次, 外在的扰动只要不使得系统能隙发生闭合, 能隙中始终存在边界态, 并且费米面和边界态相交奇数次. 这种形式的边界态是稳定的, 受拓扑保护)

2 Z_2 拓扑不变量的计算

我们考虑的系统具有时间反演对称性, 因此布

里渊区可以分成 B^+ 和 B^- 2个部分(见图3). 这2个部分的波函数可以通过时间反演算符 $\hat{\theta}=i\sigma_y\hat{C}$ 联系起来(这里 σ_y 是泡利矩阵, \hat{C} 是复共轭算符). 因此在后面的讨论中, 我们只需要将讨论的范围限制在半个布里渊区 B^+ 中. 下面我们将介绍几种等价的 Z_2 拓扑数的计算方法.

2.1 通过 Pfaffian 方法计算 Z_2 拓扑数

在文献^[25]中, Kane和Mele引入了一个矩阵 $m_{ij}=\langle u_i(k)|\hat{\theta}|u_j(k)\rangle$, 这里 $|u_j(k)\rangle=e^{-ikr}|\Psi_j(k)\rangle$ 是布洛赫波的周期部分, $\hat{\theta}$ 是时间反演算符, $i, j=1, 2, \dots, N$, N 是电子占据的能带数. 容易证明 $m(k)$ 满足 $m^T(k)=-m(k)$, 是反对称矩阵. 对反对称矩阵, 我们可以计算它的 Pfaffian 并定义方程 $P(k)$:

$$P(k) = pf[\langle u_i(k)|\hat{\theta}|u_j(k)\rangle] \quad (2)$$

如果 $P(k)$ 在布里渊区中的零点是离散的, 那么系统的 Z_2 拓扑数就是半个布里渊区 B^+ 中零点个数的奇偶性. 如果 $P(k)$ 在布里渊区中的零点是连续的, 那么系统的 Z_2 拓扑数是沿着半个布里渊区的边界上 $P(k)$ 符号改变次数一半的奇偶性^[25]. 这两种情况可以统一地写成下面的式子:

$$Z_2 = \frac{1}{2i\pi} \oint_{\partial B^+} dk \cdot \nabla_k \log [P(k+i\delta)] \text{ mod } 2 \quad (3)$$

这里积分路径 ∂B^+ 沿着半个布里渊区 B^+ 的边界, 引入 δ 可以避免积分发散. 图2给出了不同参数下石墨烯体系中 $P(k)$ 零点分别为离散和连续情况的图例^[5].

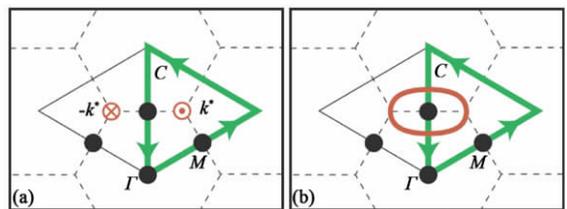


图2 $P(k)$ 的零点分布^[5](a)零点为离散的情形; (b)零点为连续的情形(其中 Γ, M 是布里渊区中的时间反演不变点, 绿色曲线 C 是绕着半个布里渊区边界的环路. 图(a)中的 k^* , $-k^*$ 分别为2个离散零点, 图(b)中红色曲线为连续零点所在的位置(见《物理》网刊彩图, 下同))

2006年, L. Fu和C. L. Kane提出了用时间反演极化定义 Z_2 拓扑数的方法. 他们证明了 Z_2 拓扑数的数值等于系统在自旋泵送周期过程中, 自旋反演极化在泵送起始点和中点上的差值. 他们给出了如下的方法来计算 Z_2 不变量^[10], 对占据态定义矩阵:

$$\omega_{ij}(k) = \langle u_i(k)|\hat{\theta}|u_j(-k)\rangle \quad (4)$$

在布里渊区中的时间反演不变点上, 矩阵满足 $\omega^T(\Gamma_a) = -\omega(\Gamma_a)$. 时间反演不变点 Γ_a 是布里渊区中满足关系 $-k = k + G$ 的点, 这里 G 为倒空间基矢. $\omega(\Gamma_a)$ 也是一个反对称矩阵, 对反对称矩阵, 它的行列式等于它的 Pfaffian 的平方, 于是我们可以定义一个数 $\delta_a = \frac{pf[\omega(\Gamma_a)]}{\sqrt{\det[\omega(\Gamma_a)]}}$, δ_a 的取值只能是 ± 1 , 然后通过下式我们可以计算出系统的 Z_2 拓扑数:

$$(-1)^{Z_2} = \prod_{a=1}^4 \frac{pf[\omega(\Gamma_a)]}{\sqrt{\det[\omega(\Gamma_a)]}} \quad (5)$$

需要注意的是, (5) 式在形式上好像只和布里渊区中的 4 个时间反演不变点处的占据态波函数有关. 但是在数值计算中, 对每个时间反演不变点上满足克拉默斯(Kramers)简并的能态, 其排列顺序的改变都会造成矩阵 Pfaffian 符号的改变. 因此要使 (5) 式有意义, 必须使波函数在半个布里渊区中连续, 使得这 4 个时间反演不变点的波函数在这个连续规范下相互关联起来, 这样才能得到确定的 Z_2 拓扑数. 这个波函数连续的要求给数值计算带来了不少困难, 但是当系统具有空间反演对称性的时候, Z_2 拓扑数的计算会得到很大简化. 这时只需要计算布里渊区中时间反演不变点处占据态波函数宇称的乘积^[10]:

$$\delta_a = \prod_{m=1}^M \xi_{2m}(\Gamma_a) \quad (6)$$

这里占据态的数目为 $2M$, ξ_i 是 Γ_a 点第 i 个波函数的宇称. Γ_a 点的波函数具有 Kramers 二重简并, 有相同的宇称, 所以求积中只取 Kramers 简并态中一个波函数的宇称. 系统的 Z_2 拓扑数由下式确定:

$$(-1)^{Z_2} = \prod_{a=1}^4 \delta_a \quad (7)$$

2.2 通过贝里联络和贝里曲率计算 Z_2 拓扑数

Z_2 拓扑数也可以按照类似计算陈数的方法, 通过布里渊区中的贝里联络和贝里曲率进行计算^[12, 26, 27]. 不过现在由于系统存在时间反演对称性, 这里的积分只需要限制在半个布里渊区中(见图 3). L. Fu 和 Kane 给出了计算 Z_2 拓扑数的如下表达式^[28]:

$$Z_2 = \frac{1}{2\pi} \left[\oint_{\partial B^+} dl \cdot A(k) - \int_{B^+} d^p k F(k) \right] \text{mod} 2 \quad (8)$$

其中 $F = \nabla \times A$ 是贝里曲率, $A = i \sum_{m=1}^M \langle u_m(k) | \nabla_k | u_m(k) \rangle$ 是贝里联络, M 是占据态的数目, $B^+ = [-\pi, \pi] \otimes [-\pi, 0]$. 如果波函数在 B^+ 上光滑连续, 那么根据斯托克斯公式, (8) 式等于 0. 因此要使得

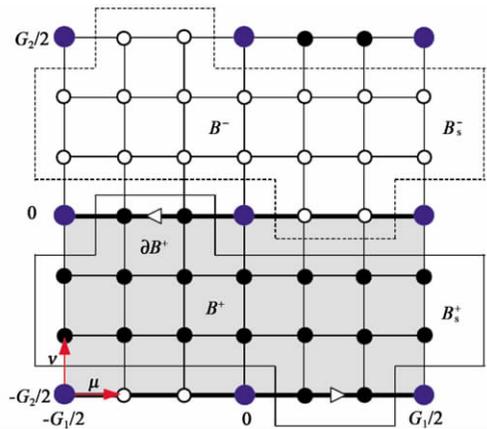


图 3 对二维系统的布里渊区进行格点化(由于系统具有时间反演对称性, 可以把布里渊区(BZ)分成图中所示的 B^+ (深色部分) 和 B^- (浅色部分) 两个部分. B^+ 和 B^- 中的波函数互为时间反演态. 蓝色圆点是时间反演不变点)

(8) 式的计算结果有意义, 需要给波函数加上如下规范限制条件:

$$|u_i(-k)\rangle = \hat{\theta} |u_i(k)\rangle \quad (9)$$

对具有非平庸拓扑性质的系统, 不可能找到在 B^+ 上光滑且同时满足限制条件(9)式这样的波函数. 因此, $Z_2 = 1$ 表明系统存在一个拓扑阻塞.

为了便于数值计算, 可以在布里渊区中取均匀的离散格点, 这样 (8) 式中的贝里联络和贝里曲率可以写成如下形式:

$$F(k_l) = \text{Im} \log [U_\mu(k_l) U_\nu(k_l + \mu) U_\mu^{-1}(k_l + \nu) U_\nu^{-1}(k_l)] \quad (10)$$

$$A_\mu(k_l) = \text{Im} \log U_\mu(k_l) \quad (11)$$

其中 $U_\mu(k_l) = \det \| \langle u_m(k_l) | u_n(k_l + \mu) \rangle \|$, μ, ν 表示离散布里渊区中倒格矢 G_1, G_2 方向上相邻格点间的距离矢量, 式中 \log 的值限制在 $[-\pi, \pi]$. 这样在离散布里渊区上的每个方格中可以定义一个整数场:

$$n(k_l) = \frac{1}{2\pi} \{ [\Delta_\nu A_\mu(k_l) - \Delta_\mu A_\nu(k_l)] - F(k_l) \} \quad (12)$$

Z_2 拓扑数由半个布里渊区 B^+ 上这些整数场之和得到:

$$Z_2 = \sum_{k_l \in B^+} n(k_l) \text{mod} 2 \quad (13)$$

对波函数取不同的规范, 整数场 $n(k_l)$ 的分布会有所改变, 但是在半个布里渊区中, $n(k_l)$ 之和的奇偶性与波函数的规范无关.

2.3 通过非阿贝尔贝里联络表示 Z_2 不变量的计算方法

下面我们介绍一种用非阿贝尔贝里联络表示 Z_2 拓扑数的计算方法^[29]. 这个方法只需要用到满足平移不变性的体材料波函数的信息, 而且不需要限制布里渊区中的波函数满足光滑连续的规范, 从而可以极大地简化计算. 这个方法对满足和不满空间反演对称性的系统都适用. 计算结果也非常直观, 很容易判断出系统的拓扑性质. 同时, 这种新方法还把 Z_2 拓扑数跟非阿贝尔贝里联络联系在一起, 提供了一种直观地观测和理解 Z_2 拓扑数的崭新视角, 具有深刻的物理意义.

这种方法的主要思想是, 计算等效一维系统的瓦尼尔函数心的演化. 我们将看到, 系统的瓦尼尔函数心的演化方式确定了系统的拓扑性质. 下面我们先给出这个方法的数学表达式和证明, 然后基于这种方法, 在数值上计算了一般绝缘体系统的 Z_2 拓扑数.

2.3.1 等效一维系统的瓦尼尔函数心

三维系统的拓扑性质可以通过降低维度变成 2 个二维系统来计算. 举例来说, 我们在由 k_x, k_y, k_z 张成的三维倒空间中, 取 $k_z = 0$ 和 $k_z = \pi$, 得到 2 个由 k_x 和 k_y 张成的二维平面. 然后从这 2 个等效的二维系统的拓扑性质就可以得到三维系统的拓扑性质. 因此, 在后面的公式推导中, 对三维系统我们默认 k_z 等于 0 和 π , 并省略不写. 对由 k_x, k_y 构成的二维系统, 我们把其中一个维度的分量(本节以 k_y 为例)当成一个可以绝热变化的参数, 这样我们进一步把系统降低了维度, 变成了一个由参数 k_y 控制的等效一维系统. 下面我们先给出这个等效一维系统占据态瓦尼尔函数心的计算方法. 下一节再给出通过瓦尼尔函数心的演化方式来判断二维系统拓扑性质的方法.

我们先定义布洛赫(Bloch)基矢:

$$|k\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_{\text{cell}}}} \sum_j e^{ik \cdot (R_j + \tau)} |j\alpha\rangle, \quad (14)$$

其中 j 标记实空间中原胞的位置, τ 是原胞内不等价原子的位置, α 是轨道和自旋指标. $|k\alpha\rangle$ 是布洛赫基函数, $|j\alpha\rangle$ 是实空间局域轨道基函数. 具有平移不变性系统的能量本征态可以用 (14) 式的 Bloch 基矢展开, $c_{m\tau}$ 是展开系数:

$$\begin{aligned} |\Psi_{nk}(r)\rangle &= \sum_{\alpha\tau} c_{n\alpha\tau} |k\alpha\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N_{\text{cell}}}} \sum_{j\alpha\tau} c_{n\alpha\tau} e^{ik \cdot (R_j + \tau)} |j\alpha\rangle. \end{aligned} \quad (15)$$

我们定义算符

$$\hat{X} = \sum_{j\alpha\tau} e^{-ik \cdot (R_j + \tau)} |j\alpha\rangle \langle j\alpha|, \quad (16)$$

其中 $\delta k_x = 2\pi/N_x a_x$, N_x 是空间中 x 方向原胞的数目, a_x 是晶格常数. 可以看到这个算符的相位有实空间位置的物理意义.

系统的拓扑性质由占据态的电子决定, 因此我们定义投影算符:

$$\hat{P}_{k_y} = \sum_{m \in o} \sum_{k_x} |\Psi_{mk_x k_y}\rangle \langle \Psi_{mk_x k_y}|, \quad (17)$$

把系统投影到 k_y 固定的占据态中. 上式中 o 表示对 $2N$ 个占据态求和. 把投影算符作用到 (16) 式上, 我们得到了固定 k_y 的描述占据态的等效一维系统的位置算符:

$$\begin{aligned} \hat{X}_P(k_y) &= \hat{P}_{k_y} \hat{X} \hat{P}_{k_y} \\ &= \sum_{m \in o} \sum_{\alpha, k_x, k'_x} c_{n\alpha}^*(k_x) c_{n\alpha}(k'_x) \delta(k_x + \delta k_x - k'_x) |\Psi_{mk_x k_y}\rangle \langle \Psi_{mk'_x k_y}|. \end{aligned} \quad (18)$$

为了方便, 上式中我们把指标 τ 吸收到了 α 中. 这个算符可以写成更直观的矩阵形式:

$$\hat{X}_P(k_y) = \begin{bmatrix} 0 & F_{0,1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & F_{1,2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & F_{2,3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & F_{N_x-2, N_x-1} \\ F_{N_x-1, 0} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (19)$$

其中

$$\begin{aligned} F_{i,i+1}^{mm} &= \sum_{\alpha} c_{n\alpha}^*(k_{x,i}, k_y) c_{n\alpha}(k_{x,i+1}, k_y) \\ &= \langle n, k_{x,i}, k_y | m, k_{x,i+1}, k_y \rangle. \end{aligned} \quad (20)$$

是 $U(2N)$ 非阿贝尔贝里联络(non-Abelian Berry's connection), $k_{x,i} = 2\pi i/N_x a_x$ 是 k_x 方向上的离散点. $|m, k_{x,i+1}, k_y\rangle$ 是本征态布洛赫函数的周期部分.

我们把 $F_{i,i+1}$ 首尾相接的连乘起来, 定义如下的一个 $W(k_y)$ 矩阵:

$$W(k_y) = F_{0,1} F_{1,2} F_{2,3} \cdots F_{N_x-2, N_x-1} F_{N_x-1, 0}. \quad (21)$$

$W(k_y)$ 是在 k_y 固定时, 由 k_x 的取值构成一个闭合环路的 $U(2N)$ 威耳逊环路(Wilson loop) (见图 4). 容易证明, 矩阵 $W(k_y)$ 的本征值和行列式是与环路上各个 k_x 点的波函数的具体规范无关的. 这个性质给数值计算带来了很大便利. $W(k_y)$ 矩阵有 $2N$ 个本征值:

$$\lambda_m(k_y) = |\lambda_m| e^{i\theta_m(k_y)}, \quad m = 1, \dots, 2N. \quad (22)$$

后面我们将看到 $|\lambda_m| = 1$, 本征值的相位 $\phi_m(k_y)$ 是等效一维系统占据态的瓦尼尔函数心^[30]. 绝热地变化 k_y 的值, 可以得到这个一维系统瓦尼尔函数心的演化曲线. 在下一节中, 我们将详细讨论 $\phi_m(k_y)$ 演化曲线与系统拓扑性质的联系.

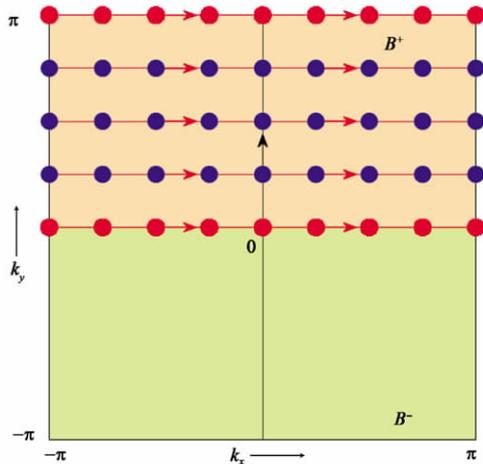


图 4 布里渊区被分成 B^+ 和 B^- 两个区域. 在 B^+ 中, 先把 k_y 固定, 让 k_y 沿着红色箭头方向形成一个一维的闭合环路 (因为布里渊区具有周期性, $k_y = -\pi$ 和 $k_y = \pi$ 处的状态是相同的), 按照 (21) 式, 可以定义一个 $U(2N)$ 威耳逊环路矩阵. 这个矩阵本征值的相位即为该等效一维系统占据态的瓦尼尔函数心. 然后让 k_y 沿着黑色箭头从 0 变化到 π , 可以得到系统瓦尼尔函数心的演化图像. 布里渊区中红色点线 ($k_y = 0$ 和 $k_y = \pi$) 是满足时间反演对称性的 2 个一维系统, 可以证明这 2 个等效一维系统的瓦尼尔函数心是 2 重简并的

2.3.2 Z_2 拓扑不变量

上一节通过 $U(2N)$ 威耳逊环路给出了计算等效一维系统瓦尼尔函数心 $\phi_m(k_y)$ 的数学表达式, 这一节中我们将给出 $\phi_m(k_y)$ 与 Z_2 拓扑不变量的联系.

因为系统存在时间反演对称性, 积分限制在 B^+ 中, 并且对布里渊区中的波函数作如下规范限制:

$$|n, -k\rangle = \hat{\theta} |n, k\rangle \quad (n = 1, 2, 3 \dots 2N), \quad (23)$$

式中 $2N$ 为系统占据态的数目. 因为系统处于非平庸拓扑相时会存在拓扑阻塞, 使得不可能在整个布里渊区上找到连续的、且满足上面限制条件的波函数, 所以我们把布里渊区分成两部分: B^- 和 B^+ , 并假设波函数在 B^- 和 B^+ 内部都连续, 不连续性只发生在 B^- 和 B^+ 的交界线上, 即图 4 中所示的 $k_y = 0$ 和 $k_y = \pi$ 两条线. 我们先把贝里联络沿着 k_x 方向积分, 定义一个 $U(1)$ 威耳逊环路:

$$\Phi(k_y) = \oint_{-\pi}^{\pi} dk_x A_x(k_x, k_y). \quad (24)$$

这样 (8) 式可以表示为

$$Z_2 = \frac{1}{2\pi} \left[\int_0^{\pi} dk_y \partial_{k_y} \Phi(k_y) - (\Phi(\pi) - \Phi(0)) \right] \text{mod} 2, \quad (25)$$

下面我们给出 (21) 式定义的 $W(k_y)$ 矩阵和 $\Phi(k_y)$ 的联系. 在 (20) 式中, 当 $\delta k_x \ll 2\pi$ 时,

$$\begin{aligned} F_{i,i+1}^m &= \langle n, k_{x,i}, k_y | m, k_{x,i+1}, k_y \rangle \\ &= \delta_{mm} + \langle n, k_{x,i}, k_y | m, k_{x,i+1}, k_y \rangle \\ &\quad - \langle n, k_{x,i}, k_y | m, k_{x,i}, k_y \rangle \\ &= \delta_{mm} - ia_x^{mm}(k_{x,i}, k_y) \delta k_x \\ &\approx e^{-ia_x^{mm}(k_{x,i}, k_y) \delta k_x}, \end{aligned} \quad (26)$$

其中 $a_x^{mm}(k_{x,i}, k_y) =$

$$i \frac{\langle n, k_{x,i}, k_y | m, k_{x,i+1}, k_y \rangle - \langle n, k_{x,i}, k_y | m, k_{x,i}, k_y \rangle}{\delta k_x}$$

是贝里联络矩阵的离散偏分形式. 这样, (21) 式中的 $W(k_y)$ 可以改写成

$$\begin{aligned} W(k_y) &= \prod_{i=0}^{N_x-1} F_{i,i+1}(k_y) = \prod_{i=0}^{N_x-1} e^{-ia_x^{mm}(k_{x,i}, k_y) \delta k_x} \\ &= P e^{\int_{-\pi}^{\pi} -ia_x^{mm}(k_x, k_y) dk_x} \end{aligned} \quad (27)$$

上式是连续模型下的 $U(2N)$ 威耳逊环路.

将 (24) 式和 (27) 式代入到大家熟知的等式 $\det[e^Q] = e^{\text{Tr}[Q]}$ (Q 为矩阵) 中, 得到

$$\det[W(k_y)] = e^{-i\Phi(k_y)}, \quad (28)$$

$W(k_y)$ 的本征值为 $e^{-i\phi_n(k_y)}$, 所以有

$$\Phi(k_y) = - \sum_{n=1}^{2N} \phi_n(k_y) \text{mod } 2\pi. \quad (29)$$

把 (29) 式代入 (25) 式, 得到

$$Z_2 = \frac{1}{2\pi} \sum_{n=1}^{2N} \left[\int_0^{\pi} dk_y \partial_{k_y} \phi_n(k_y) - (\phi_n(\pi) - \phi_n(0)) \right] \text{mod} 2. \quad (30)$$

上式给出了等效一维系统瓦尼尔函数心 $\phi_n(k_y)$ 与系统 Z_2 拓扑数的联系.

相位 $\phi_n(k_y)$ 有 2π 的不确定性, 因此 $\sum_{n=1}^{2N} \phi_n(k_y)$ 有 $4N\pi$ 的不确定性, 这使得 (30) 式右边求和中 $2N$ 的不确定性, 但是这不改变 Z_2 的奇偶性, 因此 (30) 式定义的 Z_2 拓扑数是良好的, 即与相位的不确定性无关. 为了方便, 我们限定 $\phi_n(k_y = 0)$ 和 $\phi_n(k_y = \pi)$ 的取值在 $[0, 2\pi]$ 区间, 这样得到

$$\int_0^{\pi} dk_y \partial_{k_y} \phi_n(k_y) = \phi_n(\pi) - \phi_n(0) + 2\pi M_n, \quad (31)$$

M_n 即为 $\phi_n(k_y)$ 的缠绕数. 把 (31) 式代入 (30) 式, 可得到本节最重要的公式:

$$Z_2 = \sum_{n=1}^{2N} M_n \text{ mod } 2, \quad (32)$$

即系统的 Z_2 拓扑数等于等效的一维系统瓦尼尔函数心缠绕数之和模 2. 我们还可以证明这种方法和 (5) 式方法的等价性^[29].

为了方便理解,在图 5 中,我们给出了占据态为 2, $M_1=0, M_2$ 分别等于 0, 1, 2, 3 的一个例子. $\phi_n(k_y=0)$ 离开 $k_y=0$ 的两重简并点后会劈开,到 $k_y=\pi$ 处再汇合. 由于 $\phi_n(k_y)$ 具有 2π 的周期性,在图 5(a), (c), (e), (g) 中给出了它的几种演化方式. 为了方便说明问题,在图 5(b), (d), (f), (h) 中,我们把 $\phi=0$ 和 $\phi=2\pi$ 这两条线粘合到一起,这样在 k_y 和 ϕ 空间中构成了一个圆柱体. 随着 k_y 的变化, ϕ_n 的演化曲线在圆柱体上缠绕,缠绕的圈数即为缠绕数. 在图 5(a) 中, $\phi_{1,2}$ 的缠绕数都为 0, 按照 (32) 式计算得到 $Z_2=0$. 在图 5(c) 中, ϕ_1 的缠绕数为 0, ϕ_2 的缠绕数为 1, 对应到图 5(d) 中, 可以看到 $\phi_{1,2}$ 缠绕圆柱面正好一圈, 得到 $Z_2=1$. 同样可以看出图 5(f) 中缠绕数为 2. 但在图 5(f) 中, P 点处的简并属于偶然简并, 不受时间反演对称性的保护, 在外在扰动下, 简并点会打开(如图 5(f) 中绿色线所示). 这样在拓扑结构上图 5(f) 就和图 5(a) 等价了, 因此 $Z_2=0$. 同样的道理, 图 5(h) 的拓扑性质和图 5(d) 是一样的, 系统的拓扑数 $Z_2=1$. 对更多占据态的系统, 可以通过计算 ϕ_n 穿过 $\phi=2\pi$ (或者其他任何一条方便的参考线) 的次数来确定系统的 Z_2 拓扑数. 具体的例子见下一节对真实材料系统的计算.

2.3.3 数值结果

本节我们把上面提出的方法用于真实材料的计算中. 现以二维 graphene 系统为例, 通过系统的瓦尼尔函数心的演化曲线来判断它们的拓扑性质.

Graphene 具有二维的六角格子结构, 它由 2 套子格(A 子格和 B 子格)组合而成. Kane 和 Mele 提出了一个满足时间反演对称性、包含自旋轨道耦合相互作用项的有效模型^[6]:

$$H = t \sum_{\langle i,j \rangle} c_i^\dagger c_j + i\lambda_{so} \sum_{\langle i,j \rangle} v_{ij} c_i^\dagger s_z c_j + i\lambda_R \sum_{\langle i,j \rangle} v_{ij} c_i^\dagger (s \times \hat{d}_{ij})_z c_j + \lambda_v \sum_i \xi_i c_i^\dagger c_i, \quad (33)$$

其中自旋指标吸收到了升降算符中. 第 1 项 t 是最近邻跃迁项. 第 2 项 λ_{so} 是次近邻间的自旋轨道耦合相互作用项. 第 3 项是破坏 z 方向反演对称性的 Rashba 项. 第 4 项描述 2 套子格的在位能, 这一项破坏平面内的反演对称性. 在 k 空间中, 哈密顿量

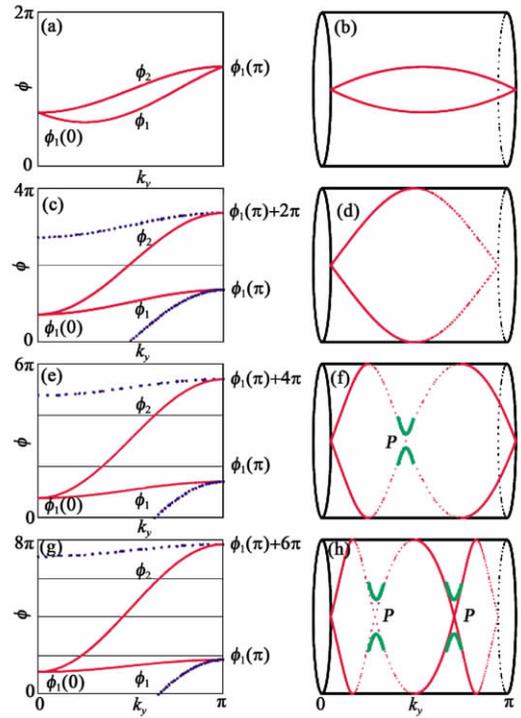


图 5 一个占据态为 2 的假想系统的例子. 图(a), (c), (e), (g) 给出了占据态的瓦尼尔函数心的几种演化方式. 因为相位 ϕ 有 2π 的周期性, 为了方便讨论问题, 我们把 ϕ 方向上等于 0 和 2π 的线粘连起来构成一个圆柱, 这样很容易看出瓦尼尔函数心在圆柱上的缠绕数分别为 (b) 0, (d) 1, (f) 2, (h) 3. 在 $k_y=0$ 和 $k_y=\pi$ 处, 由于时间反演对称性, $\phi_n(k_y)$ 是双重简并的. 但在 (f) 和 (h) 中的偶然简并点 P 不受时间反演对称性保护, 在外扰下简并破除, 使得它们的拓扑性质分别和 (b) 和 (d) 相同

可以写成

$$H(k) = \sum_{\alpha=1}^5 d_{\alpha}(k) \Gamma_{\alpha} + \sum_{\alpha=1}^5 d_{\alpha\beta}(k) \Gamma_{\alpha\beta}, \quad (34)$$

其中 $\Gamma_{1,2,3,4,5} = (I \otimes \sigma_x, I \otimes \sigma_z, s_x \otimes \sigma_y, s_y \otimes \sigma_x, s_z \otimes \sigma_y)$, σ, s 分别是描述子格空间和自旋空间的泡利矩阵, $\Gamma_{\alpha\beta} = \frac{[\Gamma_{\alpha}, \Gamma_{\beta}]}{2i}$, d_{α} 和 $d_{\alpha\beta}$ 的形式见表 1.

表 1 (34) 式中非零系数的具体形式(其中 $x=k_x a/2, y=\sqrt{3}k_y a/2$)

d_1	$t(1+2\cos x \cos y)$	d_{12}	$-2t \cos x \sin y$
d_2	λ_v	d_{15}	$2\lambda_{so}(\sin 2x - 2\sin x \cos y)$
d_3	$\lambda_R(1 - \cos x \cos y)$	d_{23}	$-\lambda_R \cos x \sin y$
d_4	$-\sqrt{3}\lambda_R \sin x \sin y$	d_{24}	$\sqrt{2}\lambda_R \sin x \cos y$

文献[6]给出了 graphene 的相图: 不同的 $\lambda_R, \lambda_{so}, \lambda_v$ 参数值, 可以使系统处于普通绝缘体相(insulating phase)或者量子自旋霍尔相(quantum spin hall phase)(见图 6).

这里我们取普通绝缘体相的一组参数值为:

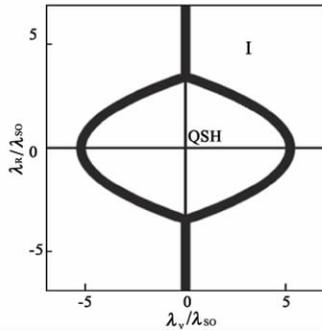


图6 石墨烯(graphene)在不同参数下的相图^[5](曲线内部是量子自旋霍尔态(QSH),曲线外部是普通绝缘体相(I))

$\lambda_R = 0.05t, \lambda_{SO} = 0.06t, \lambda_V = 0.4t$. 这里选 t 作为能量单位;取量子自旋霍尔态的一组参数值为: $\lambda_R = 0.05t, \lambda_{SO} = 0.06t, \lambda_V = 0.1t$. 我们用这个模型计算两种物相下系统的瓦尼尔函数心的演化曲线,得到的结果如图7所示. 图7(a)是取量子自旋霍尔相参数值的情形,图7(b)是取普通绝缘体相参数值的情形. 图中红色虚线是选取的参考线. 在图7(a)中,瓦尼尔函数心和参考线相交一次,按照2.3.2节给出的判断方法,这个系统的 Z_2 拓扑数等于1. 在图7(b)中,瓦尼尔函数心和参考线相交零次,也可以向上移动参考线,使相交次数为2次,但得到的 Z_2 拓扑数仍然等于0. 这样我们通过计算瓦尼尔函数心演化曲线得到的 Z_2 拓扑数,跟以前通过其他方法计算得到的结果完全一致.

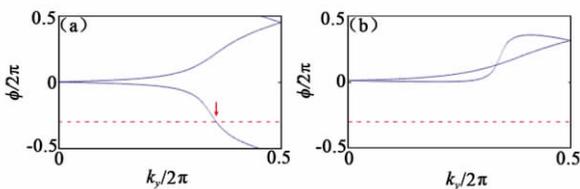


图7 石墨烯(graphene)系统的瓦尼尔函数心演化曲线 (a)瓦尼尔函数心演化曲线(蓝色实线)和参考线(红色虚线)相交一次,可以判断出系统处于量子自旋霍尔态;(b)瓦尼尔函数心演化曲线和参考线相交零次,可以判断出系统处于普通绝缘体态

3 结束语

本文我们回顾了几种满足时间反演不变性的绝缘体系统的 Z_2 拓扑数的计算方法,并给出了一种通过 $U(2N)$ 非阿贝尔贝里联络表示 Z_2 拓扑数的计算方法. 这种方法的优势在于计算过程中不需要限定波函数的规范,可以很方便地嵌入到数值计算的程序中. 基于这个方法,我们以石墨烯(graphene)系统为例,计算了系统瓦尼尔函数心演化的图像,非常

直观地判断出了系统的拓扑性质,得到了和前面研究相同的结论.

参考文献

[1] Nakahara M. Geometry, Topology and Physics. Bristol: Adam Hilger, 1990

[2] Thouless D J, Kohmoto M, Nightingale M P *et al.* Phys. Rev. Lett. , 1982, 49(6):405

[3] Wen X G. Advances in Physics, 1995, 44(5):405

[4] Klitzing K V, Dorda G, Pepper M. Phys. Rev. Lett. , 1980, 45(6):494

[5] Kane C L, Mele E J. Phys. Rev. Lett. , 2005, 95(14):146802

[6] Kane C L. Nat. Phys. , 2008, 4(5):348

[7] Fu L, Kane C L, Mele E J. Phys. Rev. Lett. , 2007, 98(10):106803

[8] Roy R. Phys. Rev. B, 2009, 79(19):195322

[9] Moore J E, Balents L. Phys. Rev. B, 2007, 75(12):121306

[10] Fu L, Kane C L. Phys. Rev. B, 2007, 76(4):045302

[11] Teo J C Y, Fu L, Kane C L. Phys. Rev. B, 2008, 78(4):045426

[12] Fukui T, Hatsugai Y. J. Phys. Soc. Jpn. , 2007, 76:053702

[13] Ran Y, Zhang Y, Vishwanath A. Nat. Phys. , 2009, 5:298

[14] Zhang H J, Liu C X, Qi X L *et al.* Nat. Phys. , 2009, 5(6):438

[15] Chen Y L, Analytis J G, Chu J H *et al.* Science, 2009, 325(5937):178

[16] Hsieh D, Qian D, Wray L *et al.* Nature, 2008, 452(7190):970

[17] Xia Y, Qian D, Hsieh D *et al.* Nat. Phys. , 2009, 5(6):398

[18] Analytis J G, Chu J H, Chen Y *et al.* Phys. Rev. B, 2010, 81(20):205407

[19] Hsieh D, Xia Y, Qian D *et al.* Phys. Rev. Lett. , 2009, 103(14):146401

[20] Park S R, Jung W S, Kim C *et al.* Phys. Rev. B, 2010, 81(4):041405

[21] Shen S Q. Quantum hall effect of the surface states in topological insulator. arXiv:0909.4125, September 2009

[22] Yan B, Liu C X, Zhang H J *et al.* 2010, 90(3):37002

[23] Lin H, Andrew W L, Xia Y *et al.* Nat. Mater. , 2010, 9(7):546

[24] Shan W Y, Lu H Z, Shen S Q. New J. Phys. , 2010, 12(4):043048

[25] Kane C L, Mele E J. Phys. Rev. Lett. , 2005, 95(22):226801

[26] Fukui T, Hatsugai Y, Suzuki H. J. Phys. Soc. Jpn. , 2005, 74:1674

[27] Xiao D, Yao Y, Feng W *et al.* Phys. Rev. Lett. , 2010, 105(9):096404

[28] Fu L, Kane C L. Phys. Rev. B, 2006, 74(19):195312

[29] Yu R, Qi X L, Bernevig A *et al.* An equivalent expression of Z_2 topological invariant for band insulators using non-Abelian Berry's connection. arXiv:1101.2011v1

[30] Marzari N, Vanderbilt D. Phys. Rev. B, 1997, 56(20):12847