

二维拓扑材料的新进展 ——纯平锡烯中存在大的拓扑能隙

姚杰 赵爱迪[†] 王兵^{††}

(中国科学技术大学 合肥微尺度物质科学国家研究中心 合肥 230026)

2019-02-17收到

[†] email: adzhao@ustc.edu.cn^{††} email: bwang@ustc.edu.cn

DOI: 10.7693/wl20190507

近年来,得益于拓扑物理理论和二维材料制备的迅速发展,以量子自旋霍尔绝缘体为代表的二维拓扑材料的研究受到热切关注^[1, 2]。早在2005年前后,理论表明在二维材料体系如石墨烯^[3]和HgTe量子阱体系^[4]中由于自旋轨道耦合作用而存在拓扑量子自旋霍尔效应。然而石墨烯中的碳是轻元素,自旋轨道作用非常微弱,所以其拓扑能隙太小。HgTe由于由重元素组成,自旋轨道耦合作用较强,其拓扑量子自旋霍尔态在2007年的实验中得到验证^[5],但仍需在很低的温度下才能得以实现。人们期望能在更高温度乃至室温下工作的具有更大拓扑能隙的量子自旋霍尔体系的发现。

对于第四主族的元素而言,人们很快预言了更重的元素如硅、锗的翘曲型类石墨烯结构中可能存在更大能隙的量子自旋霍尔态,其物理机制

与石墨烯一样都是由Kane—Mele模型描述,即由于自旋轨道耦合作用在电子能带 K 和 K' 点的 π 轨道狄拉克点处打开拓扑能隙。这一能隙在硅烯和锗烯中分别可以达到1.5—2.0 meV和23.9—30.0 meV^[6]。对于锡烯则可以达到100 meV^[7],理论上已经足够抵抗室温的热涨落,使实现接近室温条件量子自旋霍尔效应成为可能。其中,对锡烯的细致理论研究还得到了另一个非常有趣的结果,即对锡烯的化学修饰能够提供额外调控拓扑态的自由度:将锡烯的 p_z 轨道用氢或卤素等饱和,将会破坏 π 轨道的狄拉克特性,同时在 $K(K')$ 点处打开非常大的能隙,此时锡烯的输运特性将由布里渊区中心 Γ 点处的 σ 轨道决定。理论计算预言,对于锡烯晶格拉伸的调控能够实现 s 和 p_{xy} 轨道的能带反转,从而使得锡烯进入由文献[4]中Bernevig—Hughes—Zhang模型描述的量子自旋霍尔绝缘态

(图1)。这一拓扑态具有多重优越性:它可以通过化学修饰来实现,并可以有效地通过改变晶格常数来调控量子自旋霍尔态的出现和消失,即拓扑相变。更巧妙的是,由于 p_{xy} 轨道是平面内的锡原子之间的化学键轨道,所以理论上其拓扑性非常鲁棒,不会受到衬底和吸附物的影响和破坏。因此,锡烯是一种理想的大能隙二维拓扑绝缘体,有望实现室温量子自旋霍尔效应,在拓扑

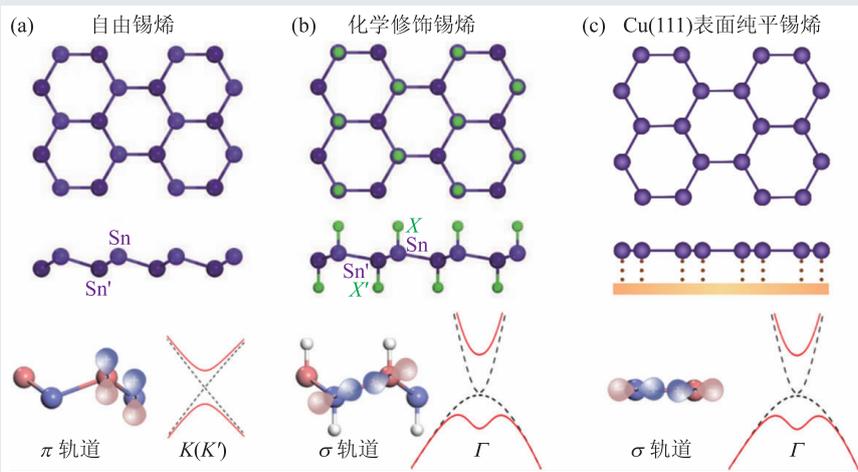


图1 自由锡烯(a)、化学修饰锡烯(b)、Cu(111)表面纯平锡烯(c)的原子结构俯视图和侧视图(上、中)、分子轨道模型(下左)和能带结构(下右)示意图。其中黑色虚线和红色实线分别为未考虑和考虑自旋轨道耦合的低能能带(改编自文献[2])

电子学器件应用方面具有重要的意义^[7]。理论同时还预言了锡烯有可能被调控实现拓扑超导态、优越的热电效应、近室温的量子反常霍尔效应等新奇特性^[8-10]。过去几年中,国内外多个研究组在不同的衬底表面制备了单层锡烯^[11-15],但由于受衬底影响,这些已制备出的锡烯都具有非平面的翘曲结构且均未表现出拓物性。因此,实验制备具有拓扑特性的锡烯,成为二维类石墨烯材料物性研究的一项重要挑战。

针对上述问题,我们发展了低温分子束外延的方法以精细控制锡原子的表面吸附和扩散,在Cu(111)上外延生长出高质量的样品。通过扫描隧道显微镜(STM)证实了其纯平锡烯单层薄膜,并在角度分辨光电子能谱(ARPES)结果中观测到在 Γ 点处打开了一个高达0.3 eV的拓扑间隙。通过与清华大学以及美国斯坦福大学的理论组开展合作研究,结合第一性原理的理论计算,表明了这一锡烯结构的电子能带中由于自旋轨道耦合作用,出现面内的 $s-p$ 能带反转,会在 Γ 点处打开与实验观测一致的拓扑间隙。这些实验和理论结果证明纯平锡烯单层薄膜具有显著的拓扑特征。这是首次在第四主族类石墨烯的纯平材料中实现这一新奇性质^[16]。进一步的理论计算还预言了在纯平蜂巢结构的锗烯和铅烯中也存在类似的拓扑特性,从而构成了一类新型的二维拓扑材料家族。

在这一工作中,我们选取了Cu(111)单晶作为衬底,主要是由于其表面的晶格常数为2.55 Å。锡烯在该表面按 2×2 公度生长将使晶格常数拉伸为5.1 Å,符合理论预言的进入量子自旋霍尔绝缘态的要求。然而,在室温和高温下的沉积结果表明锡烯都形成了 $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ 的翘曲结构,并且由于较高温

度下的结构弛豫使其晶格常数仅为4.5 Å,不具有晶格拉伸效应。通过实验探索,我们发现将衬底温度控制在200 K附近时,锡原子按照二维模式生长,并且择优形成 2×2 公度的蜂巢结构,其晶格常数为5.1 Å,表现出明显的面内晶格拉伸。令人惊奇的是,这一方法生长出的蜂巢结构的单胞中AB位原子无高度差,表现为理想的纯平六角蜂巢晶格,即完全类似石墨烯的纯平结构,如图2(a, b)所示。人们知道,除石墨烯外的二维 X 烯($X=Si, Ge, Sn$)通常表现为翘曲蜂巢结构,这是由于它们的 π 键较弱,因而通过形成翘曲结构允许 $\pi-\sigma$ 相互作用,使得翘曲结构比平面结构更稳定。理论计算分析表明,在我们得到的纯平锡烯中之所以能形成类似石墨烯的纯平结构,其主要原因是Cu衬底与锡烯之间存在较强的相互作用,使得低温生长的纯平锡烯得以稳定。理论分析进一步说明,Cu衬底不仅起到稳定锡烯纯平结构、拉伸锡烯晶格的作用,还对其产生轨道过滤的作用。这一作用通过Cu衬底将锡烯中的 p_z 轨道几乎

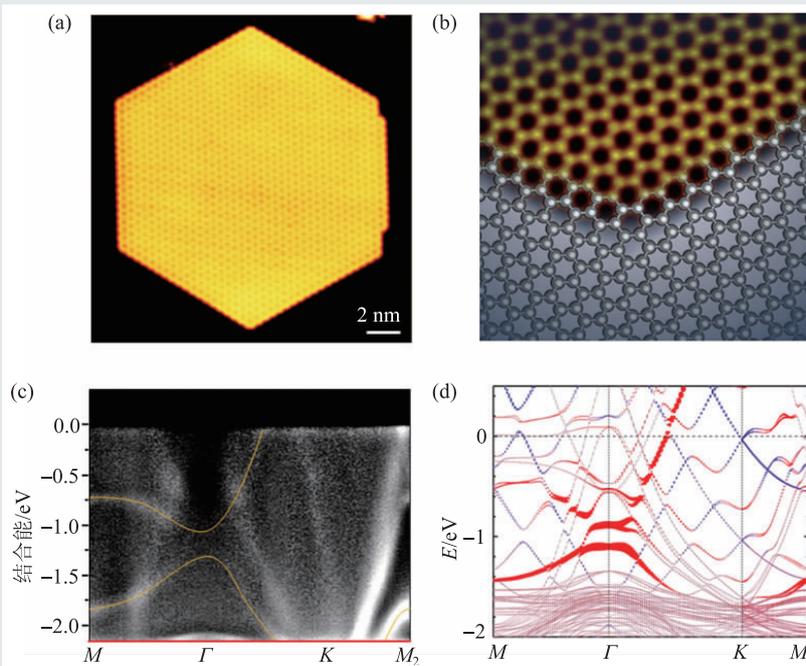


图2 (a)单层纯平锡烯薄膜的STM图像;(b)原子分辨STM图像及其原子模型的叠加图;(c)90%覆盖率的纯平锡烯的ARPES谱,黄色实线为锡烯的能带,其余为Cu衬底能带;(d)理论计算的能带图,红色和蓝色点分别代表来自锡的 p_x 和 p_y 轨道的贡献(改编自文献[16])

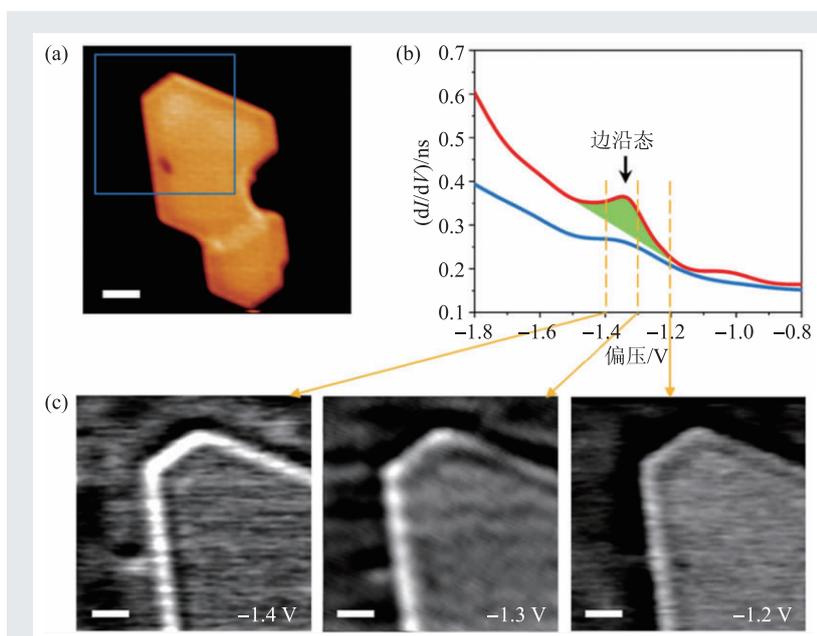


图3 (a)单层岛状纯平锡烯的STM图像；(b)单层纯平锡烯的STS谱，其中红色和蓝色分别为边沿处和中心处测量，绿色阴影为增强的电子态密度；(c)不同偏压下的 dI/dV 图，扫描区域为(a)中的蓝色实线框。可以看到在-1.3 V偏压附近，纯平锡烯的边沿均显示存在增强的电子态密度(改编自文献[16])

-1.25 eV)中存在约为0.3 eV能隙的两条能带，如图2(c)所示。理论计算表明，这一能隙特征的出现符合Bernevig—Hughes—Zhang模型所预言的拓扑能带反转所导致的大拓扑能隙，如图2(d)所示。我们同时测量了岛状的纯平锡烯的扫描隧道谱(STS)(图3)，发现在-1.3 V偏压附近， dI/dV 图像和STS均观察到锡烯的边沿的确存在显著增强的电子态密度，表明了锡烯存在拓扑边沿态的可能性。

在这一工作中，我们所观测到的拓扑能隙大小约0.3 eV，远超室温热涨落能量，这对于未来实现近室温乃至室温工作的拓扑量子器件具有重要的意义。具有拓扑能带反转和大拓扑能隙的纯平锡烯的实验发现，为类石墨烯

的拓扑物性材料添加了新成员，将对二维量子材料的研究起到积极的作用。

致谢 感谢清华大学徐勇、段文晖以及斯坦福大学张首晟等的合作。

完全饱和，其作用类似于化学修饰的氢化锡烯和卤化锡烯，最终结果表现为其低能电子特征主要由 Γ 点处贡献，替代了石墨烯中由 $K(K')$ 点贡献的特征。通过高分辨的ARPES实验，对比纯净的Cu(111)表面和90%锡烯覆盖的表面，发现在后者的布里渊区中心 Γ 点附近的占据态(Γ 点处大约位于

参考文献

- [1] Hasan M Z *et al.* Rev. Mod. Phys., 2010, 82: 3045
- [2] Molle A *et al.* Nat. Mater., 2017, 16: 163
- [3] Kane C L *et al.* Phys. Rev. Lett., 2005, 95: 226801
- [4] Bernevig B A *et al.* Science, 2006, 314: 1757
- [5] König M *et al.* Science, 2007, 318: 766
- [6] Liu C C *et al.* Phys. Rev. Lett., 2011, 107: 076802
- [7] Xu Y *et al.* Phys. Rev. Lett., 2013, 111: 136804
- [8] Xu Y *et al.* Phys. Rev. Lett., 2014, 112: 226801
- [9] Wu S C *et al.* Phys. Rev. Lett., 2014, 113: 256401
- [10] Liao M H *et al.* Nat. Phys., 2018, 14: 344
- [11] Zhu F F *et al.* Nat. Mater., 2015, 14: 1020
- [12] Guo J *et al.* Phys. Rev. Mater., 2017, 1: 054004
- [13] Zang Y Y *et al.* Adv. Funct. Mater., 2018, 28: 1802723
- [14] Xu C Z *et al.* Phys. Rev. B, 2018, 97: 035122
- [15] Yuhara J *et al.* 2D Mater., 2018, 5: 025002
- [16] Deng J L *et al.* Nat. Mater., 2018, 17: 1081

磁场仪器

赫姆霍兹线圈系统

- 500mm和1m直径线圈
- 直流补偿设备
- 500mm线圈直流时产生磁场500 μ T,在5kHz时可达100 μ T
- 可选不同轴数的功率放大器和控制器



Mag-03三轴磁场探头

- 低噪声版： $<6\text{pTrms}/\sqrt{\text{Hz}}$ at 1Hz
- 标准噪声： 6 到 $\leq 10\text{pTrms}/\sqrt{\text{Hz}}$ at 1Hz
- 基础噪声： >10 到 $20\text{pTrms}/\sqrt{\text{Hz}}$ at 1Hz，
- 带宽典型为3kHz，量程从 $\pm 70\mu\text{T}$ 到 $\pm 1000\mu\text{T}$



Mag628/Mag629和Mag669宇航认证的三轴磁力仪

- 量程： $\pm 75\mu\text{T}$
- 感应轴共点
- 工作电源：28V (Mag629)
- 连续工作温度范围： -55°C 到 55°C
- 依据MIL-STD-810 (振动和冲击)和MIL-STD-202 (热冲击)设计，适于集成到机载平台
- 低噪声：在1Hz时， $<8\text{pTrms}/\sqrt{\text{Hz}}$ (Mag628/Mag629)或在1Hz时， $<4\text{pTrms}/\sqrt{\text{Hz}}$ (Mag669)



北京优赛科技有限公司
地址：北京市石景山区八角东街65号融科创意中心A座1403室
电话：010-68487691 传真：010-68700626
E-mail:sales@eusci.com 网址：www.eusci.com



www.bartington.com
Bartington[®]
Instruments



ILOPE - 2019 北京光电周

Photonics Festival in Beijing

中国国际激光、光电子及光电显示产品展览会
China International Lasers, Optoelectronics and Photonics Exhibition
2019.10.30-11.01 北京·中国国际展览中心(静安庄馆)
Beijing · China International Exhibition Center (CIEC)

 中展集团北京华港展览有限公司
Tel: +86-10-84600314 84600333
Email: ilope-expo@ciec.com.cn

 中国光学光电子行业协会
Tel: +86-10-84321499
Email: coema@coema.org.cn



北京欧普特科技有限公司

Golden WAY SCIENTIFIC 专心/专注/专业

二十年的默默耕耘，风雨兼程，铸就了欧普特人“专心”，“专注”，“专业”的风格和品质，孜孜不倦地对创新和品质的追求，让欧普特具备了全线覆盖低，中，高，超高功率激光光学元件的加工生产和检测能力。
伴随中国激光行业的蓬勃发展，欧普特愿与您共同进步，砥砺前行，为中国光电事业的发展 and 进步共同尽一份心力和责任。

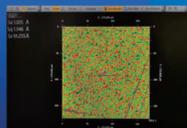
精密光学元件

1. 球面透镜
2. 柱面&非球面透镜
3. 光学棱镜
4. 反射镜(玻璃&金属)
5. 光学窗口
6. 偏振&消偏元件
7. 滤光片
8. 光栅

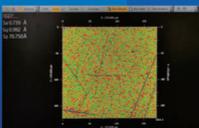


激光器件

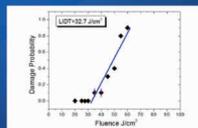
1. 扫描场镜(紫外-红外)
2. 线扫镜头
3. 紫外远心镜头
4. 中继镜
5. 扩束镜



(熔石英基材, 直径50.8mm光学窗口)



(单晶硅基材, 1070nm高反膜)



关注二维码

 北京市朝阳区酒仙桥东路
1号M7栋东五层

 www.goldway.com.cn
Email: optics@goldway.com.cn

 Tel: +86-(0)10-8456 0667
Fax: +86-(0)10-8456 9901