拓扑量子体系中的长波光电探测

张凯旋 陈支庆子 王 林^{*} (中国科学院上海技术物理研究所 红外物理国家重点实验室 上海 200083) 2020-11-05收到

† email: wanglin@mail.sitp.ac.cn DOI: 10.7693/wl20210106

拓扑绝缘体是一类体态绝缘而表面态具有金 属特性的材料,它作为一种全新的量子物质,引 起了人们对新型拓扑相的关注。寻找自然界中新 的拓扑材料已经成为近十几年来凝聚态物理中的 研究热点。继拓扑绝缘体之后,能带结构的拓扑 分类又被扩展到了金属体系,出现了另一类具有 特殊电子结构的拓扑材料,即拓扑半金属。拓扑 半金属的能带交叉点在费米能上,并且它具有耗 散低、极高的载流子迁移率,以及自旋电性可控 等特点^[1-3],可以用来制作低能耗的光电子学器 件,极大地促进了光电子技术、信息科学和半导 体技术等领域的发展。

拓扑半金属材料具有丰富多样的拓扑表面态,根据其准粒子的激发是否可以打破洛伦兹不变性分为第一类外尔/狄拉克半金属(Na₃Bi, TaAs, NbAs, Cd₃As₂等)^[4]和第二类外尔/狄拉克半金属(MoTe₂,WTe₂,PtSe₂,PtTe₂,PdTe₂等)^[5]。如图1 (a),(b)所示,第一类拓扑半金属的狄拉克点/外尔点在导带和价带相交于一点,但是第二类拓扑 半金属中的狄拉克点/外尔点出现在电子口袋和空 穴口袋的交叉边界,能带结构出现强烈的倾斜。

此外,拓扑半金属具有显著的手性关联输运 特性、非线性光学现象、拓扑超导等常规材料所 不具备的奇异物理性质,并具有较大的态密度以 及强的光一物质相互作用能力。近年来,已有相

(a)
 (b)
 (c)
 (c)

关研究表明拓扑半金属能够在宽带光电探测方面 表现出优异性^[7,8]。基于第二类拓扑半金属材料零 带隙的能带结构以及能带在交点附近严重倾斜导 致的各向异性,已经实现了在中波红外的高灵敏 光电探测以及偏振光电探测¹⁹。其中在外尔点附 近贝里曲率发散引起的光电流增强被证明是提升 光电探测性能的关键^[10]。所有这些非平庸物理现 象的观测依赖于中红外(光子能量~sub-eV)能量激 发、弛豫所导致的基态或低能激发态的输运,然 而在长波波段(光子能量~meV)的低光子能量下, 拓扑半金属材料的激发效率将会急剧下降。另一 方面,零带隙的拓扑半金属材料面临的暗电流问 题是造成光子探测器信号湮没的另外一个关键因 素。传统的长波红外光子探测器(碲镉汞、量子 阱、Ⅱ类超晶格探测器等),通过组分掺杂缩小禁 带或子带以匹配光子能量的方式,促使光子激发 形成电子--空穴对,然而随着波长的增加,器件 需要在极低温工作来抑制暗电流或热噪声以维持 光子激发的量子效率,因而长波光子探测面临着 极大的难度。因此,从传统光子探测器思路来 说, 拓扑半金属材料由于更大的暗电流噪声, 认 为其并不适合室温下的长波红外探测。

然而,拓扑半金属由于对称保护的电子态具 有独特的载流子特性,如太赫兹激发下的动态手 性反常性、反常霍尔效应、手性太赫兹场发射等

> 等,预示着利用光子的电、磁分 量进行探测的可行性,而这种电 磁效应并不类似于光子探测模式 面临的热噪声极限问题。当前已 确定第二类拓扑半金属材料可以 有效吸收长波红外的电磁场能 量,但仍然需要深入理解其拓扑



图2 (a)碲化钯(PdTe₂)的晶体结构;(b)PdTe₂的三维狄拉克锥;(c)PdTe₂费米面的 电子一空穴费米包结构;(d)基于PdTe₂的光电探测器原理图(金色图案是亚波长的金 属电极,沟道处的材料是拓扑半金属);(c)太赫兹光电转换机理,C₃等效的双金字 塔结构;(f)理想的材料极化场与对称面的相对方向微观图;(g)C₃对称的光致电流 效应(photogalvanic,PGE)的光电流微观分布;(b)偏压调控的光电流机制原理图

特征对光电信号产生的影响。

针对此,我们采用具有第二类狄拉克半金属 特征的碲化钯(PdTe₂)材料并构建了相关的器件结 构。如图2(a)所示,PdTe₂具有原子堆叠的拓扑对 称性结构,在晶体的对称保护下,PdTe₂的狄拉克 锥在 $k_x - k_z$ 平面上的投影如图2(b)所示^[11],并在 $k_x - k_y$ 费米面形成电子和空穴包,使得该材料具 有各向异性动量分布以及大的长波光子吸收系 数,如图2(c)所示。

为了深入理解第二类拓扑狄拉克半金属的微观电子态电磁响应过程,我们提出了一种基于亚波长的金属一拓扑半金属一金属(MTM)结构来探测太赫兹长波光子(图2(d))。金属电极采用特殊设计的对数(log)周期性天线结构,并通过FDTD电磁仿真验证其宽带耦合特性。首先,我们通过紫外光刻、电子束蒸发等一系列制备工艺,对天线耦合的平面PdTe₂器件进行光电响应研究。亚波长的金属电极(S和D)可以将长波长的光子有效耦合

到拓扑半金属的表面(电极沟道处 的材料), 增强电磁波与狄拉克费 米子的相互作用。相对于光子探 测方式,通过电磁场耦合的方式 可以根据目标波长进行合理设 计,从而可实现宽的调谐范围。 在实验中发现, 金属Cr与PdTe2界 面电荷转移形成界面态,通过金 属对数天线耦合的共同作用引起 PdTe₂表面电子产生周期性的驱动 震荡,即在金属--材料界面附近 会产生电荷转移和电场局域化的 协同作用。由于第二类拓扑半金 属PdTe2无带隙性质,在太赫兹辐 射的作用下,其光子吸收会得到 增强,同时光电流也会由于大的 费米子态密度变得增强。

通过对不同器件结构的偏振 探测研究发现,界面电荷和电场 的不对称破坏了C₃载流子散射概 率/动量分布的对称性,进而产生

无需电偏压的横向电流(PGE效应)(图2(e),(f)), 导致了器件中一个大的二阶非线性光电流的产 生。在没有太赫兹辐射的情况下,各向异性散射 电子的流动会被完全抵消,因此不会有光电流产 生。在太赫兹光子的电磁驱动下,产生的感应电 流方向取决于电场偏振极化和晶轴的相对方向。

我们基于密度泛函理论并结合非平衡格林函数的第一性原理模拟包nanodcal^[12]计算了PdTe₂的输运特性,采用原子轨道线性组合以及赝势场的方法,通过PBE(Perdew—Burke—Ernzerhof)广义梯度近似引入自旋—轨道耦合交换关联相互作用,揭示了PdTe₂体系受晶格对称性保护形成第二 类狄拉克锥结构,从理论上定性地证明了各向异性光电流的存在。为了验证局部材料—金属界面的光电流分布特性,我们采用了垂直电极、环形电极等器件结构,形成对入射电磁波的耦合调控,通过改变电磁场的偏振方向,从而改变电磁场的分布以便更好地体现光电流的变化与局部电 磁分量、材料对称性的关联性。通过环形电极的 偏振实验与电磁模态的分布,进一步验证了C_{3v}对 称特性的整流光电流以及偏振控制现象(图2(g))。 另外,通过进一步施加偏置电压(*E*_{DC})可以打破沟 道的平面对称,使非平衡载流子沿电场横向移 动,局域于金属一材料界面附近的非平衡载流子 除了产生偏压无关的光电流外,还产生与*E*_{DC}成比 例的净非线性分量(图2(h))。

我们实现的第二类狄拉克半金属材料室温太

参考文献

- [1] Rostami H et al. Phys. Rev., 2018, 97:195151
- [2] Yuan H et al. Nat. Nanotechnol., 2015,9:851
- [3] Zyuzin A A et al. Phys. Rev. B, 2016, 95:085127
- [4] Gao Y et al. Nat. Commun., 2020, 11:720
- [5] Chia X et al. Adv. Funct. Mater., 2016, 26:4306
- [6] Yan B et al. Annu. Rev. Conden. Ma. P., 2016, 8:337
- [7] Wang Q et al. Nano. Lett., 2017, 17:834

赫兹探测器,表现出较强的光电流响应、低噪 声、低功耗的优异性能,且具有偏振敏感的各向 异性光电流,通过有效结合拓扑半金属时间一空 间反演对称性保护的特征、强的长波光子吸收与 电磁特性,有望为下一代太赫兹长波光电器件设 计提供新思路。该成果有利于促进凝聚态物理的 前沿探索与光电子器件应用的交叉研究,已于近 期在 Science Advances 上发表^[13]。

[8] Yang M et al. ACS Photonics, 2018, 5(8); 3438
[9] Lai J et al. Adv. Mater., 2018, 30; 1707152
[10] Ma J et al. Nat. Mater., 2019, 18:476
[11] Fei F et al. Phys. Rev. B, 2017, 96:041201
[12] Taylor J et al. Phys. Rev. B, 2001, 63:245407
[13] Guo C et al. Sci. Adv., 2020, 6:6500

