

# 拓扑绝缘体电子态的电场调控

常 凯<sup>†</sup>

(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<sup>†</sup>

(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<sup>[1,2]</sup>.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<sup>[3-5]</sup>.目前人们已经发现了许多拓扑绝缘体,如 HgTe, BiSe, BiTe 等<sup>[6-9]</sup>.

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

<sup>†</sup> 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<sup>[10]</sup>. 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年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<sup>[11]</sup>(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.

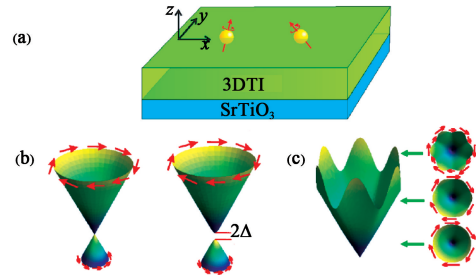


图 1 (a) 三维拓扑绝缘体(3DTI)的表面磁离子构型示意图(底部蓝色(见《物理》网刊彩图,下同)部分是底电极);(b) 表面态能带和自旋指向示意图(其中  $2\Delta$  是磁离子极化打开的能隙);(c) 考虑能带翘曲(warping)效应的能带示意图

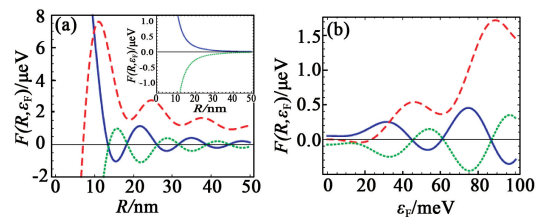


图 2 RKKY 相互作用程函数随(a)磁离子距离 R 和(b)费米能  $\epsilon_F$  的变化(图中蓝色实线是海森伯项的程函数,红色和绿色虚线分别对应 DM 项和伊辛项的程函数. 图(a)中的插图是费米能位于 Dirac 时的程函数)

## 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<sup>[12]</sup>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<sup>[13,14]</sup>,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),而这对于光来说,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型光现象,从而实现全力学地控制电子输运.

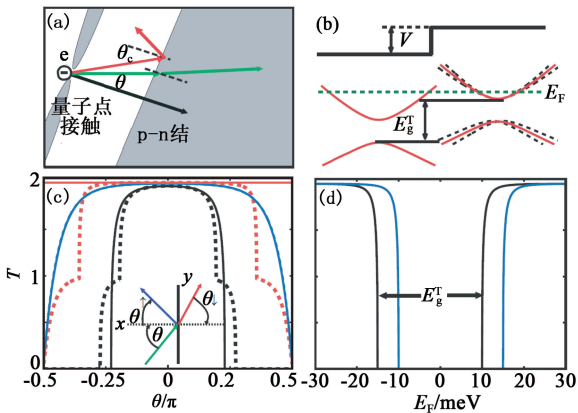


图3 (a) HgTe 二维电子气 p-n 结示意图(阴影部分是栅极区域,电子从量子点接触射入 p-n 结);(b) p-n 结两侧能带图和电势构型图;(c) 电子透射率与入射角度  $\theta$  的关系(实线是不同栅压下的透射率,虚线是不同栅压下存在 Rashba 自旋轨道耦合时的电子透射率);(d) 不同栅压下,特定角度入射时,电子透射率与费米能  $E_F$  的关系

#### 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.主要的原因是目下对 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<sup>[15]</sup>.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.但是负带隙量子点( $M < 0$ )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

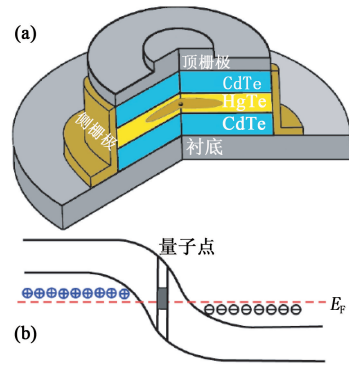


图4 (a) 刻蚀法制备的 HgTe 量子点结构示意图;(b) 埋有 HgTe 量子点的 p-n 结结构示意图

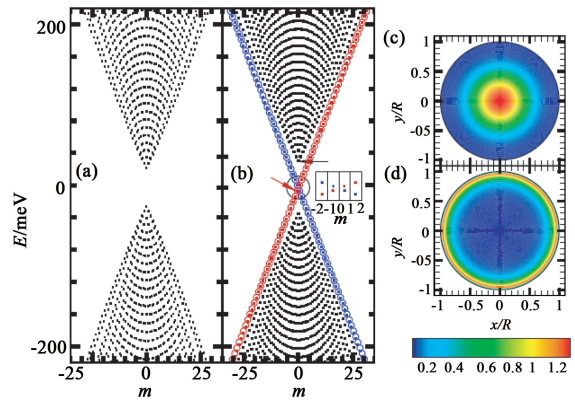


图5 (a)和(b)分别对应 HgTe 量子点的正常相和拓扑绝缘体相的能级图(其中横坐标  $m$  是角动量量子数);(c)和(d)分别是量子点中体内态和边缘态的几率分布图(其中  $R$  是量子点半径)

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.

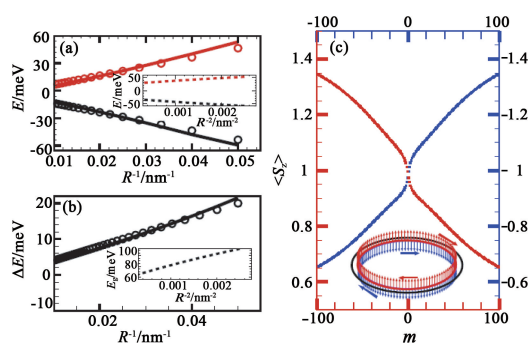


图 6 (a)量子点能级能量  $E$  和(b)能级差  $\Delta E$  与量子点半径  $R$  的关系(图(b)中插图的纵坐标  $E_g$  是有效能隙); (c) 边缘态电子自旋  $\langle S_z \rangle$  与角动量量子数  $m$  的关系

## 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, 352: 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