

# 最大能隙拓扑绝缘体\*

宋志刚 杨金波 吕劲<sup>†</sup>

(北京大学物理学院 北京 100871)

2015—05—07收到

<sup>†</sup> email: Jinglu@pku.edu.cn

DOI: 10.7693/wl20150806

按照导电性通常把晶体分为金属、半金属、半导体和绝缘体四类，他们的导电性依次降低。近些年来，一种新的晶体被发现，它的体内是绝缘的而表面可以是金属态，这种特性是由贝里曲率在布里渊区域的拓扑性质决定的，因此被称为拓扑绝缘体。不同于普通绝缘体的能带，拓扑绝缘体的表面态(或者边缘态)存在锥状能带<sup>[1]</sup>，这和光子的色散关系相似<sup>[2]</sup>，这种能带物质代表一种相对论准粒子，可以用狄拉克方程描述，因此被称为狄拉克费米子<sup>[3]</sup>。

拓扑绝缘体因存在奇异的导电的表面态，近年来在科学界引起了极大的关注。二维的拓扑绝缘体在边缘态存在一维金属态，可以表现出自旋量子霍尔效应，故又称为量子自旋霍尔绝缘体<sup>[4]</sup>。二维的拓扑绝缘体在边缘态是背散射禁止的<sup>[4]</sup>，因此电阻比较小。在时间反演对称性不被破坏的情况下，二维拓扑绝缘体在边缘态承载无电流的自旋流(图1(a))，有望作为自旋电子器件材料。能隙是拓扑绝缘体的最重要指标之一。拓扑绝缘体如果体能隙小，在制备过程中带来的掺杂或者在有限温度下的热激发会使其体内产生载流子，尽管这不会破坏表面态但是会对表面的金属态的测量和应用产生干扰。寻找大体能隙材料，一直是拓扑绝缘体研究的一个努力方向<sup>[5]</sup>。按体能隙大小可将拓扑绝缘体划分为不同的代：第一代以 $\text{Bi}_2\text{Sb}_{1-x}$ 为代表，体能隙大约0.1 eV；第二代以 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 为代表，体能隙约为0.3 eV<sup>[6-8]</sup>。

最近北京大学的杨金波课题组、吕劲课题组和北京理工大学姚裕贵课题组合作，通过第一性原理计算，预测六角蜂巢状的功能化的Bi和Sb单层( $\text{BiX/SbX}$ ,  $X=\text{H}, \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}$ )是稳定的拓

绝缘体，其体能隙最大达到1.08 eV，是目前拓扑绝缘体的体能隙的最大值，有望成为第三代拓扑绝缘体(图1(b))。

$\text{BiX/SbX}$ 单层结构和石墨烷类似，Bi/Sb原子组成一个六元环，存在不等价A, B两个位置，占在A, B晶格上的Bi/Sb原子组不在同一平面内，存在着起皱( $h=0.8-2.4 \text{ \AA}$ )(图2(a))。从热力学的角度来看，这种二元结构的形成能相对Bi/Sb和H的单质来说是正的，也就是说单质更稳定。但是 $\text{BiH}_3/\text{SbH}_3$ 分子是存在的，而且形成能高于单层 $\text{BiH}/\text{SbH}$ ，因此单层 $\text{BiH}/\text{SbH}$ (我们称之为铋烷/锑烷)也可能是存在的。同时振动分析表明，单层 $\text{BiH}/\text{SbH}$ 无虚频，这也证明单层 $\text{BiH}/\text{SbH}$ 是动力学稳

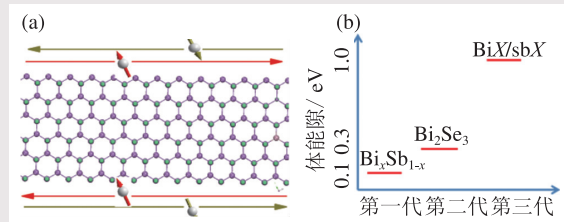


图1 (a)单层蜂巢状量子自旋霍尔绝缘体的边缘态示意图；(b)拓扑绝缘体按体能隙的代划分示意图

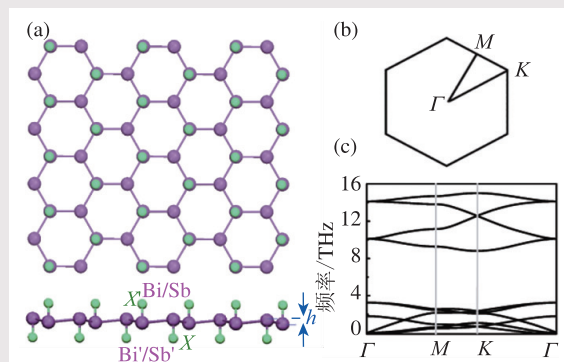


图2 (a)单层 $\text{Bi(Sb)X}$  ( $X=\text{H}, \text{F}, \text{Cl}$ 和 $\text{Br}$ )晶体结构的俯视图和侧视图(在一个单元晶胞中,  $\text{BiX/SbX}$ 原子是 $\text{BiX/SbX}$ 原子的空间反演结果); (b)单层 $\text{BiX/SbX}$ 的第一布里渊区域和高对称点; (c)单层 $\text{BiH}$ 的声子谱

\* 国家自然科学基金(批准号: 51371009, 51171001, 11174337, 11225418, 50971003, 11274016)资助项目

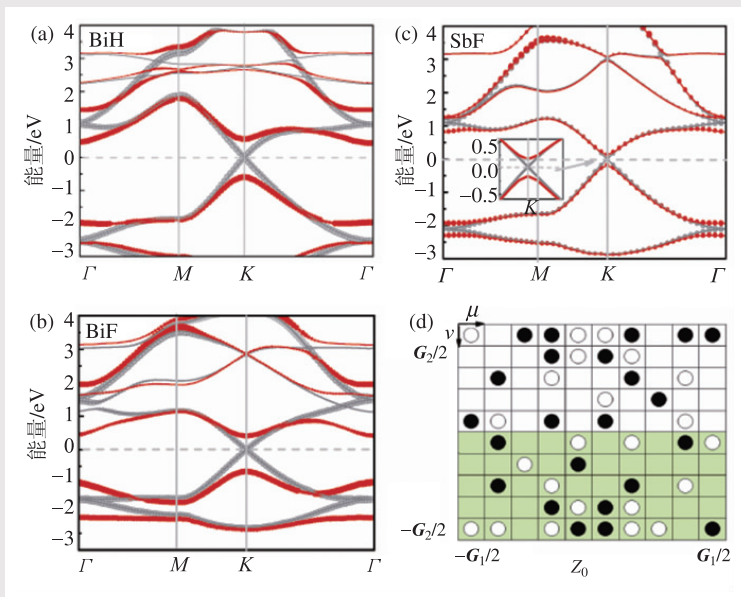


图3 不考虑自旋轨道耦合(灰线)和考虑自旋轨道耦合(红线)的单层BiX的能带结构 (a)单层BiH; (b)单层BiF; (c)单层SbF(费米能级设定为零。费米能级处的能带由 $p_x$ 和 $p_y$ 电子轨道组成,线宽正比于 $p_x$ 和 $p_y$ 电子轨道权重); (d)单层BiH的 $n$ -场构型(两个倒格矢 $G_1$ 和 $G_2$ 构成了 $120^\circ$ 的夹角。空心圆和实心圆分别代表 $n=1$ 和 $n=-1$ ,空白代表 $n=0$ 。 $Z_2$ 拓扑不变量是通过对比布里渊区域上的 $n$ 求和并且对2求余得到的)

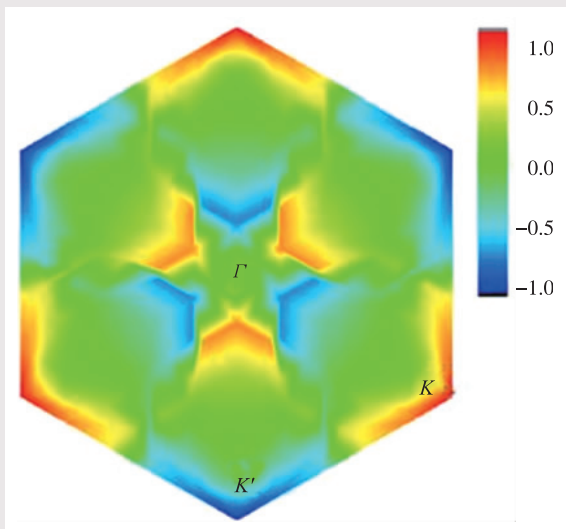


图4 电场下倒空间的光圆极化度(反映 $K$ 、 $K'$ 谷分别吸收左旋和右旋的圆偏振光的程度)

定的。分子动力学模拟表明,单层BiX能够承受600 K的温度,单层SbX在300 K(室温)是稳定的。

单层BiX/SbX具有和明星材料石墨烯相似的能带,当不考虑自旋轨道耦合时,在六角布里渊区域角点( $K$ 和 $K'$ )存在无带隙的狄拉克锥(对应着一种无质量的狄拉克费米子),它应该是一种半金

属。由于元素Bi/Sb的相对论效应很强,不考虑自旋轨道耦合是不合理的,在考虑自旋轨道耦合效应之后,单层BiX在 $K$ 和 $K'$ 点会出现约1.2 eV的局域带隙,导致整个材料成为具有大约1 eV间接带隙的半导体,这是目前发现的最大带隙的拓扑绝缘体,是 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 的三倍。单层BiX/SbX的能带在 $K$ 和 $K'$ 点主要由Bi/Sb的 $p_x$ 和 $p_y$ 轨道成分构成(图3),低能模型显示,单层BiX/SbX在 $K$ 和 $K'$ 点主要是在位型的自旋轨道耦合。而石墨烯在 $K$ 和 $K'$ 点的能带由C的 $p_z$ 成分构成,自旋轨道耦合是跳跃式的。先前的理论表明, $p_x$ 和 $p_y$ 轨道成分狄拉克费米子可以形成拓扑平带,实现电子维格纳结晶化<sup>[9, 10]</sup>。理论上来说应该存在两条拓扑平带,事实上单层BiX/SbX的能带只有一条拓扑平带(费米面下第二条),另一条由于杂化作用而不存在。

一种绝缘体是否是拓扑绝缘体,最直接的方法是,看其是否存在自旋锁定的边缘态,或者计算布里渊区域的拓扑序参量( $Z_2$ )。 $Z_2=0$ 标志着普通绝缘体, $Z_2=1$ 标志拓扑绝缘体。三维体系需要用4个序参量来描述其拓扑性质,为简单起见,这里仅介绍二维体系。序参量 $Z_2$ 定义为

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

其中 $F(k)$ 是贝里曲率, $A(k)$ 为贝里联络,并且有 $F(k)=\nabla \times A(k)$ 。等式右边第一项的积分范围是半个布里渊区域,第二项的积分范围则是在半个布里渊区域的边界上。利用上式并不能直接计算出 $Z_2$ ,必须将序参量按照类似计算陈数的方法转化成整数场( $n$ -场)来计算。计算结果<sup>[11, 12]</sup>表明,所有单层BiX/SbX都是拓扑非平凡的,也就是说,它们都是拓扑绝缘体(图3(d))。进一步的计算表明,温度引起的晶格畸变并不能改变这类材料的拓扑性质。

单层BiX/SbX由于其六角蜂巢状结构 $C_3$ 对称性,时间反演关联的 $K$ 和 $K'$ 是不等价的。 $K$ 和 $K'$ 可以作为一个自由度的两个态,这个自由度称为

谷自由度,也就是说, $K$ 和 $K'$ 可以像自旋的上、下态那样作为信息的载体,因此又称为谷赝自旋。在反演对称破缺的情况下,例如在垂直电场的调控下,单层 $\text{BiX/SbX}$ 存在谷磁矩,这种磁矩是由于布洛赫波的旋转造成的,不同的谷所携带的谷磁矩方向相反。在磁场的作用下,它们会有相反响应。当 $K$ 和 $K'$ 谷占据的电子不对称时,体系就可表现出磁性。

密度泛函模拟表明,垂直加偏压的单层 $\text{BiX/SbX}$ 具有谷选择的圆二色性(图4),即 $K$ 和 $K'$ 附近分别只吸收左旋和右旋的圆偏振光。这样我们就可以选择性地激发 $K$ 或者 $K'$ ,让 $K$ 或者 $K'$ 以及它们附近的物理性质分别显示出来。 $K$ 和 $K'$ 谷的贝里曲率大小相等、方向相反,当面内电场存在时,贝里曲率像磁场一样会在垂直于电场的方向上产生一个额外的电子速度(称为反常速度),因此在电子掺杂、空穴掺杂以及圆偏振光的激发情况下,反演对称被破坏的单层 $\text{BiX/SbX}$ 可以表现出谷的霍尔效应(称为谷霍尔效应)。在电子掺杂、空穴掺杂情况下,产生谷流,而不产生电流;在圆偏振光激发下,只存在电流(反常霍尔效应);在椭圆光的激发下可以同时产生电流和谷流<sup>[13]</sup>。

此外,单层 $\text{BiX/SbX}$ 存在强烈而新奇的谷赝自旋和自旋的耦合,这有利于研究自旋电子学和谷电子学的交叉领域。强烈而新奇的谷赝自旋和自旋的耦合导致谷磁矩是自旋依赖的。 $\text{BiX/SbX}$ 的自旋轨道耦合可受电场的调控,从而其谷赝自旋也要受到调控。基于单层 $\text{BiX/SbX}$ 的电场响应特点,可以设计出谷场效应晶体管。值得一提的是,在电场不足以引起单层 $\text{BiX/SbX}$ 转变成金属(击穿)的情况下,单层 $\text{BiX/SbX}$ 依然是拓扑非平凡的,说明有电场存在时,单层 $\text{BiX/SbX}$ 是量子自旋霍尔绝缘体相和谷霍尔绝缘体相共存的。

该工作发表在材料顶级期刊*NPG Asia Materials*上<sup>[14]</sup>。文章刊出后,国内外其他课题组根据我们的预测开展了很多类似的工作。

## 参考文献

- [1] Knez I, Du R R, Sullivan G. *Phys. Rev. Lett.*, 2011, 107:136603
- [2] Bernevig B A, Hughes T L, Zhang S C. *Science*, 2006, 314:1757
- [3] Kane C L, Mele E J. *Phys. Rev. Lett.*, 2005, 95:226801
- [4] Konig M *et al.* *Science*, 2007, 318:1148047
- [5] Xu Y *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2013, 111:136804
- [6] Hasan M Z, Kane C L. *Rev. Mod. Phys.*, 2010, 82:3045
- [7] Qi X L, Zhang S C. *Rev. Mod. Phys.*, 2011, 83:1057
- [8] Moore J. *Nat. Phys.*, 2009, 5:378
- [9] Wu C J, Bergman D, Balents L *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2007, 99:070401
- [10] Wu C J, Das Sarma S. *Phys. Rev. B*, 2008, 77:235107
- [11] Fukui T, Hatsugai Y. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 2007, 76:053702
- [12] Kane C L, Mele E J. *Phys. Rev. Lett.*, 2005, 95:146802
- [13] Song Z, Li Y, Feng J *et al.* arXiv preprint, arXiv:1408.0685 (2014)
- [14] Song Z G *et al.* *NPG Asia Mater.*, 2014, 6:e147; doi:10.1038/am.2014.113

## 美国Time封面刊登 D-Wave量子计算机: 选用Bluefors & Cryomech低温制冷机

### BlueFors

CRYOGENICS



BF-LD BF-SD BF-Horizontal  
无液氮稀释制冷机

### CRYOMECH

WORLD LEADERS IN CRYOREFRIGERATION FOR MORE THAN 50 YEARS



氮回收及液化系统、脉管制冷机、GM制冷机、氮再液化器、低温恒温槽、液氮系统

## Cryomech和Bluefors中国 唯一销售及技术服务商

提供覆盖各主要温区(最低至几毫K)的低温设备及系统。敬请随时联系我们,我们可以提供各类定制化设计的低温解决方案。

赛浩(上海)仪器有限公司

[www.scikro-instru.com](http://www.scikro-instru.com)

+86-21-69133626

info@scikro-instru.com

### SCIKRO