

铁磁绝缘体间的极薄  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  薄膜的相变研究\*王怀强 杨运友<sup>†</sup> 鞠艳 盛利 邢定钰

(南京大学固体微结构物理国家重点实验室和物理学院, 南京 210093)

(2012年7月6日收到; 2012年9月11日收到修改稿)

研究一个极薄三维拓扑绝缘体  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  薄膜处于两个铁磁绝缘体层之间, 其铁磁层的磁化方向都处于竖直平面, 系统拓扑性质随磁化方向夹角的变化. 从表面态电子低能有效哈密顿量出发计算系统的 Chern 数, 和运用一个具有 Armchair 边界的单层六角晶格带的紧束缚模型模拟系统的体能带和边缘态, 来确定系统所处的拓扑相. 发现两个铁磁层的磁化方式从平行转到反平行的某一临界角度, 系统经历从反常量子霍尔相到普通绝缘相的转变.

**关键词:** 拓扑绝缘体, 交换场, 反常量子霍尔效应, 边缘态

**PACS:** 72.25.-b, 73.20.At, 73.50.-h, 73.43.Qt

**DOI:** 10.7498/aps.62.037202

## 1 引言

拓扑绝缘体 (TI) 是一类由时间反演对称性保护的量子自旋霍尔态 (QSH). 它和普通绝缘体一样存在着带隙, 但是电子的自旋轨道耦合作用和时间反演对称性会产生穿过体能隙的无能隙边缘态 (二维) 或表面态 (三维). 具有狄拉克型色散关系的边缘态是由时间反演对称性保护的, 并且可以无耗散或低耗散地运输电流和自旋流<sup>[1-5]</sup>.

分子束外延 (molecular beam epitaxy, MBE) 是一种在晶体基片上生长高质量的晶体薄膜的新技术, 可以在单原子层的精度上实现对薄膜厚度的控制, 通过优化生长条件, 实现薄膜的逐层生长. 最近, 利用该方法已经成功合成很薄的三维拓扑绝缘体  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  薄膜<sup>[6-8]</sup>, 这使得三维拓扑绝缘体 (3DTI) 薄膜获得广泛关注. 实验<sup>[7]</sup> 和理论<sup>[9,10]</sup> 研究表明, 当  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  薄膜的厚度降到只有几个纳米时, 薄膜上下两个表面的耦合作用会使得中心在  $\Gamma$  点 ( $k=0$ ) 的狄拉克锥打开一个有限的能隙. 杂化能隙可以用杂化参数  $B$  和  $\Delta$  来表示, 并且可以通过调节薄膜的厚度来调控. 根据  $B \cdot \Delta > 0$  或  $B \cdot \Delta < 0$ , 薄膜可以成为具有边缘态的二维拓扑绝缘体或者普通绝缘体<sup>[8]</sup>.

研究发现, 由磁近邻效应产生的有效交换场可

以使薄膜系统进入反常量子霍尔相 (QAH)<sup>[11,12]</sup>. 因此, 可以在极薄的 3DTI 薄膜上下两个表面分别加上铁磁绝缘体层 (FI)(图 1(a)). 这样产生的交换场作用, 在不外加磁场的情况下, 可由近邻效应影响 TI 的表面态, 进而实现自旋器件的调控.

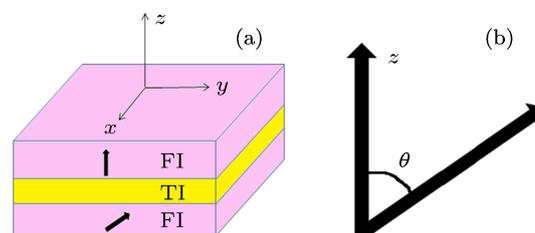


图 1 (a) FI/TI/FI 结构; (b) 竖直平面内两铁磁磁化方向夹角示意图

在实际应用中一个铁磁层可以选取磁化方向被固定的硬磁, 另一个选取磁化方向可以通过弱磁场来改变的软磁. 最近研究发现, 在处于上下铁磁层 (具有竖直磁化方向) 之间的 3DTI 薄膜中, 可以产生 100% 的巨磁阻效应<sup>[13]</sup>. 对应于平行磁化和反平行磁化, 该系统分别处在反常量子霍尔相和普通绝缘相, 霍尔电导分别为  $e^2/h$  和 0.

本文研究上下铁磁层磁化方向在竖直平面内更为一般的情况, 特别是相对磁化方向从平行转到

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11174125, 11074109) 和江苏省自然科学基金 (批准号: BK2010364) 资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯作者. E-mail: scyangy@sina.com.cn

反平行的过程中, 系统可能经历相变并寻找相变的临界夹角.

## 2 系统模型哈密顿量描述

对于这样的 FI/TI/FI “三明治” 结构的系统,  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  薄膜表面态电子的低能有效哈密顿量为

$$H = H_0 + H_1, \quad (1)$$

其中  $H_0$  是孤立  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  薄膜表面态的电子哈密顿量  $H_1$  是铁磁引起的交换场项.  $H_0$  可写成<sup>[9,14]</sup>

$$H_0 = E_0(k) + v_f(k_y \hat{\sigma}_x - k_x \hat{\sigma}_y) + \left( \frac{\Delta}{2} - Bk^2 \right) \hat{\tau}_z \hat{\sigma}_z, \quad (2)$$

(2) 式的前两项代表孤立的上下表面态电子哈密顿量, 其中  $E_0(k) = E_0 - Dk^2$   $k$  是相对狄拉克点  $\Gamma$  的电子动量,  $v_f$  是费米速度,  $\sigma_i (i = x, y, z)$  是描述电子自旋的泡利矩阵; (2) 式的第三项代表薄膜上下两个表面态的耦合作用,  $\tau_z = 1(-1)$  代表杂化成键态(反键态). 参数  $E_0, D, B, \Delta$  以及  $v_f$  依赖于薄膜的厚度, 并且已经被理论计算过<sup>[9,14]</sup>. 在本文讨论中, 选取  $B < 0, \Delta > 0$ , 此时若不考虑交换场,  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  薄膜在普通绝缘相<sup>[9]</sup>. 下面推导交换场项  $H_1$  的表达式.

耦合前系统低能有效哈密顿量基矢为  $[|P1_z^+, \uparrow\rangle, |P2_z^-, \uparrow\rangle, |P1_z^+, \downarrow\rangle, |P2_z^-, \downarrow\rangle]^T$ , 其中  $P1_z$  和  $P2_z$  分别代表 Bi 和 Se 的  $p_z$  轨道, 上标  $+(-)$  代表偶(奇)宇称, 指标  $\uparrow(\downarrow)$  代表自旋向上(下)<sup>[1]</sup>. 耦合

后的基矢为  $[\psi_{\uparrow}^{\text{BS}}, \psi_{\downarrow}^{\text{BS}}, \psi_{\uparrow}^{\text{ABS}}, \psi_{\downarrow}^{\text{ABS}}]^T$ , 这里的上标 BS (ABS) 代表杂化成键态(反键态). 两基矢之间的关系为

$$\begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}^{\text{BS}} \\ \psi_{\downarrow}^{\text{BS}} \\ \psi_{\uparrow}^{\text{ABS}} \\ \psi_{\downarrow}^{\text{ABS}} \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} |P1_z^+, \uparrow\rangle \\ |P2_z^-, \uparrow\rangle \\ |P1_z^+, \downarrow\rangle \\ |P2_z^-, \downarrow\rangle \end{pmatrix},$$

其中

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

在竖直平面内 ( $X-Z$  平面), 固定一个铁磁层磁化方向为  $Z$  方向, 另一个铁磁层磁化方向与  $Z$  方向夹角为  $\theta$  (图 1(b)). 耦合前在基矢  $[|P1_z^+, \uparrow\rangle, |P2_z^-, \uparrow\rangle, |P1_z^+, \downarrow\rangle, |P2_z^-, \downarrow\rangle]^T$  中哈密顿量表示为

$$H_{1\text{耦合前}} = g \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & 0 & \sin \theta \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & \sin \theta & 0 & -\cos \theta \end{pmatrix}. \quad (4)$$

耦合后, 变换到基矢  $[\psi_{\uparrow}^{\text{BS}}, \psi_{\downarrow}^{\text{BS}}, \psi_{\uparrow}^{\text{ABS}}, \psi_{\downarrow}^{\text{ABS}}]^T$  有

$$H_{1\text{耦合后}} = U H_{1\text{耦合前}} U^\dagger = \frac{g}{2} \begin{pmatrix} 1 + \cos \theta & \sin \theta & 1 - \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & -(1 + \cos \theta) & -\sin \theta & -(1 - \cos \theta) \\ 1 - \cos \theta & -\sin \theta & 1 + \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & -(1 - \cos \theta) & \sin \theta & -(1 + \cos \theta) \end{pmatrix}. \quad (5)$$

将 (5) 式和 (2) 式代入表达 (1) 式, 便可得到总哈密顿量表达式.

## 3 数值计算与分析

本节将基于以上模型, 讨论系统的状态以及具有的拓扑性质, 并讨论磁化方式从平行转到反平行的过程中, 系统可能经历的相变并寻找发生相变的临界夹角.

求解总哈密顿量 (1) 能量本征值, 可得:

$$E = E_0(k) \pm \sqrt{g^2 + \left( \frac{\Delta}{2} - Bk^2 \right)^2 + v_f^2 k^2 + g v_f k_y \sin \theta + 2\tau \left| g \cos \frac{\theta}{2} \right| \sqrt{\left( \frac{\Delta}{2} - Bk^2 \right)^2 + \frac{1}{2}(1 - \cos \theta) v_f^2 k_y^2}}, \quad (6)$$

其中  $\pm$  分别对应于导带和价带,  $\tau = 1(-1)$  对应于杂化成键态(反键态). 由(6)式可得导带价带间能隙  $\Delta_E$  为

$$\Delta_E = 2 \sqrt{g^2 + \left(\frac{\Delta}{2} - Bk^2\right)^2 + v_f^2 k^2 + gv_f k_y \sin \theta} + 2\tau \left| g \cos \frac{\theta}{2} \right| \sqrt{\left(\frac{\Delta}{2} - Bk^2\right)^2 + \frac{1}{2}(1 - \cos \theta)v_f^2 k_y^2} \quad (7)$$

下面按  $0 < g < \Delta/2$  和  $g > \Delta/2$  两种情况对系统进行讨论.

图 2 给出了能隙  $\Delta_E$  随  $\theta$  变化的图像. 当  $0 < g < \Delta/2$  时, 无论  $\theta$  取何值  $\Delta_E$  总为正值, 如图 2(a) 所示, 能隙一直存在且不关闭. 那么  $\theta$  在  $[0, \pi]$  间变化时, 系统总处在同一种相, 不发生相变. 同样我们算出系统在该情况下的拓扑不变量——Chern 数 ( $C$ )<sup>[15,16]</sup>, 得到  $C = 0$ , 这说明系统总是处于

普通绝缘相.

当  $g > \Delta/2$  时,  $\theta$  从 0 变化到  $\pi$  过程中, 如图 3(b) 所示, 能隙会经历一个关闭再打开的过程. 能隙关闭时的夹角为  $\theta_c$ (图中约为 1.208), 并且因交换场在平面分量不为零引起能隙闭合点相对  $\Gamma$  点有  $k_y$  的偏移(此时约为  $-0.189$ ). 当  $\theta < \theta_c$  时, 经计算得到 Chern 数  $C = 1$ , 系统处在反常量子霍尔相. 而  $\theta > \theta_c$  时,  $C = 0$  系统处于普通绝缘相.

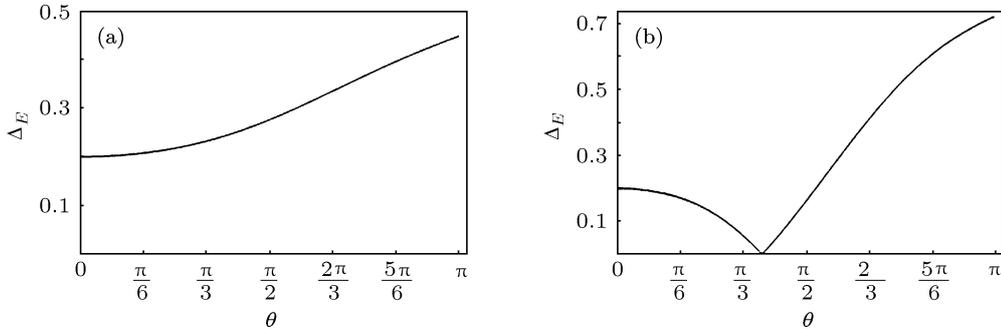


图 2  $\Delta$  取 0.2,  $g$  取不同值  $\Delta_E$ - $\theta$  曲线 (a)  $g = 0.1$ ; (b)  $g = 0.3$

于是得到: 当  $g > \Delta/2$  时, 从平行磁化转到反平行磁化的过程中, 系统经历一个能隙关闭又打开的过程中, 并伴随着从反常量子霍尔相到普通绝缘相的转变, 相变的临界夹角为能隙关闭时的夹角  $\theta_c$ .

接下来我们再研究  $\theta_c$  与  $g, \Delta$  的关系. 分别取  $\Delta = 0.2, 0.4, 0.8$  做出  $\theta_c$ - $g$  曲线如图 3 所示. 从图 3 很明显得到: 1)  $\Delta \neq 0$  时, 只有当  $g$  大于某个阈值  $g_c$  才有临界角度  $\theta_c$ , 并且此阈值  $g_c = \Delta/2$ ; 2) 在

$g > g_c$  时随着  $g$  增加,  $\theta_c$  先单调增加至最大值, 且其最大值随  $\Delta$  增大而减小, 然后继续增加  $g$ ,  $\theta_c$  单调递减, 当  $g \gg \Delta$  时,  $\theta_c \rightarrow 0$ .

#### 4 紧束缚模型对系统的模拟

为模拟系统的表面态, 我们在二维六角晶格上构造出紧束缚模型<sup>[13,17]</sup>. 令  $H' = H - E_0(k)$ , 则

$$H' = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \tau} e^{i\tau \mathbf{K} \cdot \mathbf{R}_{ij}} c_{i\tau}^+ c_{j\tau} + t_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \tau} \sigma c_{i\tau}^+ c_{j\tau} + (V - 6t_2) \sum_{i, \tau} \sigma c_{i\tau}^+ c_{i\tau} + H_1, \quad (8)$$

其中  $\tau = \pm 1$  代表每个格点上的两自旋,  $\sigma = \pm 1$  对分别对应于  $i$  取子格  $A$  和  $B$ ,  $\mathbf{R}_{i,j}$  代表从  $i$  子格指向  $j$  子格的矢量;  $\langle i,j \rangle$  代表近邻跳跃. 近邻跳跃相位  $\tau \mathbf{K} \cdot \mathbf{R}_{ij} = 0, \pm \tau \frac{2}{3} \pi$ , 是为了限定在一个狄拉克点附近讨论, 这样就与 3DTI 单狄拉克锥相对应.

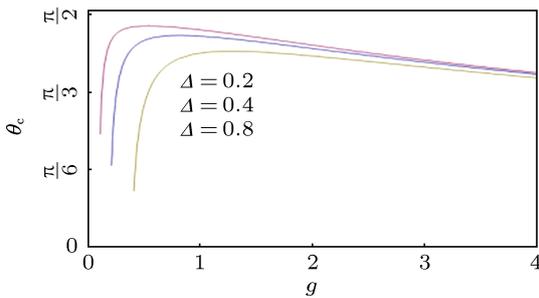


图 3  $\Delta$  分别取 0.2, 0.4, 0.8 时,  $\theta_c$ - $g$

$\ll i, j \gg$  代表次近邻跳跃. 这里用不同的子格  $A, B$  来模拟 (2) 式中电子的自旋, 称为赝自旋; 分别用每个格点上的上下自旋来模拟 (2) 式中的成键态和反键态. 已经证明 [13]: 当  $V = \Delta/2, B = \frac{9}{2}a^2t_2, v_f = \frac{3}{2}at$  时, 紧束缚模型哈密顿量 ((8) 式) 在长波极限下就与原哈密顿量 ((2) 式) 等效. 将交换场项  $H_1$  转换到格点表象, 基矢为  $[A\uparrow, B\uparrow, A\downarrow, B\downarrow]^T$ , 变换矩

阵为

$$T = \begin{pmatrix} i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

于是有:

$$H_{1\text{格点态}} = TH_{1\text{耦合后}}T^+ = \frac{g}{2} \begin{pmatrix} \cos\theta + 1 & -i\sin\theta & -\sin\theta & -i(1 - \cos\theta) \\ i\sin\theta & -\cos\theta - 1 & -i(1 - \cos\theta) & -\sin\theta \\ -\sin\theta & -i(\cos\theta - 1) & -\cos\theta - 1 & -i\sin\theta \\ -i(\cos\theta - 1) & -\sin\theta & i\sin\theta & \cos\theta + 1 \end{pmatrix}.$$

在六角晶格格点表象中二次量子化形式为

$$H_1 = \frac{g}{2} \left\{ \sum_{i\tau} (1 + \cos\theta) \sigma_z \tau_z c_{i\tau}^+ c_{i\tau} - \frac{i\sin\theta}{3} \sum_{(i,j)\tau} c_{i\tau}^+ c_{j\tau} + \left[ -\sin\theta \sum_i c_{i+}^+ c_{i-} - \frac{i(1 - \cos\theta)}{3} \sum_{(i,j)} c_{i+}^+ c_{j-} \right] + \text{H.c.} \right\}. \quad (9)$$

为了得到该二维系统的边缘态, 我们考虑一个

$x$  方向上无限长的 Armchair 边界的单层六角晶格带, 在  $y$  方向取 128 个原子并选择开放边界条件. 因为系统有  $x$  方向上的平移不变性, 所以  $k_x$  是一个好量子数. 取晶格常数  $a = 1$  与  $t = 1$  作为能量单位, 其它参数设定为  $t_2 = -0.2, V = \Delta/2 = 0.2$ .

当  $0 < g < V$  时, 无论  $\theta$  取何值, 系统总处在普通绝缘相, 没有边缘态. 取  $g = 0.1, \theta$  分别取  $0$ , 和  $\pi$ , 给出系统能带结构 (图 5).

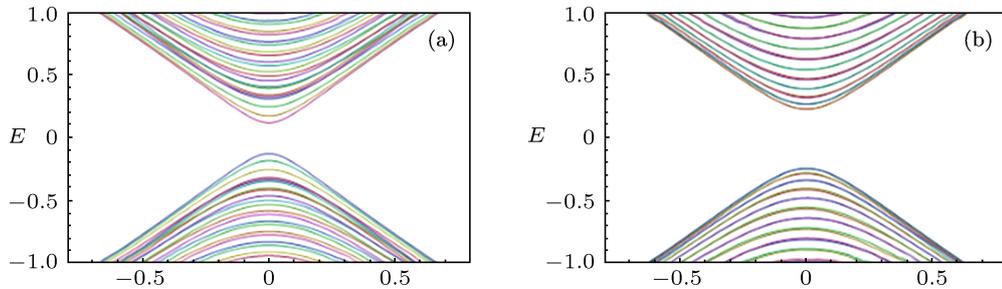


图 4  $g = 0.1$  时  $E-k_y$  色散关系曲线 (a)  $\theta = 0$ ; (b)  $\theta = \pi$

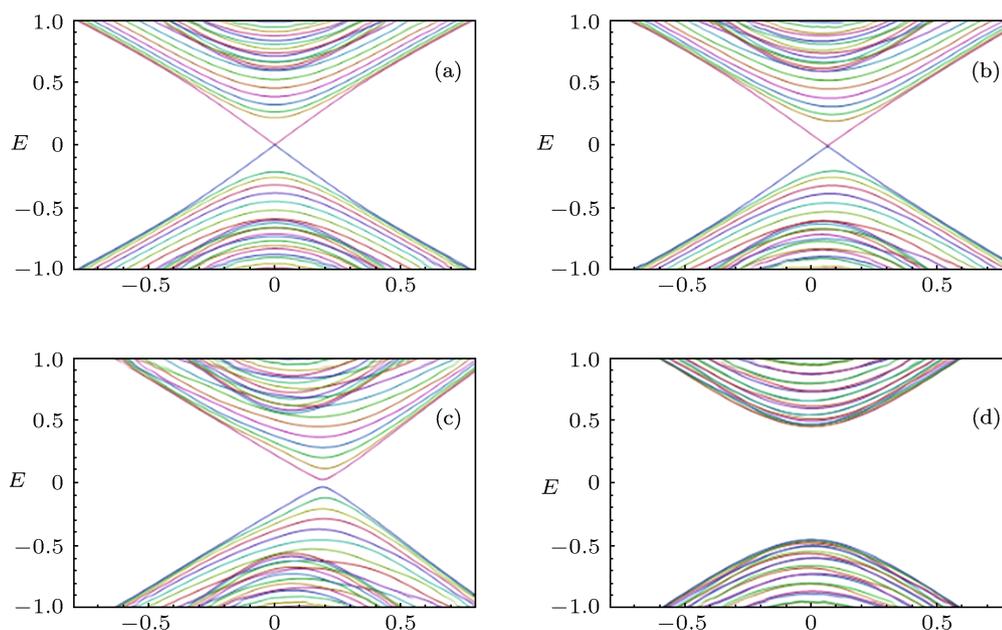
当  $g > V$  时, 取  $g = 0.4$ , 分别给出  $\theta < \theta_c, \theta = \theta_c$  和  $\theta > \theta_c$  三种情况下的能带结构 (图 5). 当  $\theta < \theta_c$  时, (图 5(a), (b)), 存在边缘态, 系统处于反常量子霍尔相, 并且当  $\theta \neq 0$  时狄拉克点有偏移 (图 5(b)). 当  $\theta = \theta_c$  时 (图 5(c)), 能隙关闭, 图中的小能隙是由于计算模型的宽度有限而造成的, 如果带宽取的足够大, 小能隙将消失. 当  $\theta > \theta_c$  时 (图 5(d)), 边缘态消失, 系统处于普通绝缘相.

最后我们使用 Landauer-Büttiker 公式  $G_{xx} =$

$(e^2/h)T(E)$  来计算系统的电导, 公式中电子输运  $T(E)$  可以用非平衡态格林函数方法求得 [17]. 假设费米能级处在体能隙间, 当  $g > V$  时, 若  $\theta < \theta_c$ , 则  $G = e^2/h$ . 这种量子化的电导是由边缘态的导电通道产生的. 若  $\theta > \theta_c$ , 则  $G = 0$ . 而当  $0 < g < V$  时,  $G$  总为 0. 因此可将文献 [13] 中的巨磁阻效应进行推广, 定义

$$MR = (G_{\theta < \theta_c} - G_{\theta > \theta_c}) / (G_{\theta < \theta_c} + G_{\theta > \theta_c}),$$

那么当  $g > V$  时就能获得 100% 的巨磁阻效应.


 图5  $g = 0.4$  时  $E-k$  色散关系曲线 (a)  $\theta = 0$ ; (b)  $\theta = \pi/6$ ; (c)  $\theta \approx \theta_c = 1.3$ ; (d)  $\theta = \pi$ 

## 5 结论

对于上下加铁磁绝缘体层的极薄三维拓扑绝缘体  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  薄膜系统, 当两个铁磁磁化方向均处于竖直平面时, 磁化方向从平行情况转到反平行过程中, 若  $0 < g < \Delta/2$ , 系统一直处在普通绝缘相, 不发生相变; 若  $g > \Delta/2$ , 系统会经历从反常量子霍尔相

到普通绝缘相的转变, 发生相变时的夹角  $\theta_c$  为系统体能隙关闭时的夹角,  $\theta_c$  的大小和  $g$  以及  $\Delta$  的取值有关。

基于以上相变过程, 通过改变铁磁层的磁化方向来调控极薄的  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  薄膜, 获得巨磁阻效应, 这在自旋电子器件中有很大的应用前景。

- [1] Zhang H J, Liu C X, Qi X L, Dai X, Zhong F, Zhang S C 2009 *Nature Phys.* **5** 438
- [2] Xia Y, Qian D, Hsieh D, Wray L, Pal A, Lin H, Bansil A, Grauer D, Hor Y S, Cava R J, Hasan M Z 2009 *Nature Phys.* **5** 398
- [3] Dai X, Hughes T L, Qi X L, Fang Z, Zhang S C 2008 *Phys. Rev. B* **77** 125319
- [4] Fu L, Kane C K, Mele E J 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 106803
- [5] Zhang T, Cheng P, Chen X, Jia J F, Ma X C, He K, Wang L L, Zhang H J, Dai X, Fang Z, Xie X C, Xue Q K 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 266803
- [6] Cheng P, Song C, Zhang T, Zhang Y Y, Wang Y L, Jia J F, Wang J, Wang Y Y, Zhu B F, Chen X, Ma X C, He K, Wang L L, Dai X, Fang Z, Xie X C, Qi X L, Liu C X, Zhang S C, Xue Q K 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 076801
- [7] Hong S S, Kundhikanjana W, Cha J J, Lai K J, Kong D S, Stefan M, Kelly M A, Shen Z X, Cui Y 2010 *Nano Lett.* **10** 3118
- [8] Zhang Y, He K, Ma X C, Xue Q K 2011 *Physics* **40** 07 (in Chinese) [张翼, 何珂, 马旭村, 薛其坤 2011 物理 **40** 07]
- [9] Lu H Z, Shan W Y, Yao W, Niu Q, Shen S Q 2010 *Phys. Rev. B* **81** 115407
- [10] Li H C, Sheng L, Sheng D N, Xing D Y 2010 *Phys. Rev. B* **82** 165104
- [11] Li H C, Sheng L, Xing D Y 2011 *Phys. Rev. B* **83** 195413
- [12] Yu R, Zhang W, Weng H M, Dai X, Fang Z 2010 *Physics* **39** 09 (in Chinese) [余睿, 张薇, 翁红明, 戴希, 方忠 2010 物理 **39** 09]
- [13] Yang Y Y, Xu Z, Sheng L, Sheng R, Xing D Y 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 182101
- [14] Thouless D J, Kohmoto M, Nightingale M P, Nijss M D 1982 *Phys. Rev. Lett.* **49** 405
- [15] Niu Q, Thouless D J, Wu Y S 1985 *Phys. Rev. B* **31** 3372
- [16] Xu Z, Yang Y Y, Sheng L, Xing D Y 2012 *J. Phys. Condens Matter* **18** 185504
- [17] Datta S 1995 *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (1st Edn.) (New York: Cambridge University Press) pp319–322

# Phase transition of ultrathin $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ film sandwiched between ferromagnetic insulators\*

Wang Huai-Qiang Yang Yun-You<sup>†</sup> Ju Yan Sheng Li Xing Ding-Yu

(National Laboratory of Solid State Microstructure and Department of Physics, Nanjing University, Nanjing 210093, China)

(Received 6 July 2012; revised manuscript received 11 September 2012)

## Abstract

For an ultra-thin  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  film sandwiched between two ferromagnetic insulators (FIs), we investigate how its topological properties change with the angle between the magnetizations of the two FIs. The Chern numbers are calculated from the low-energy effective Hamiltonian for electrons in the surface states, and the bulk energy band and the edge states are simulated from the tight-binding model of a long ribbon with armchair edges on a two-dimensional honeycomb lattice, from which the topological phase of the system can be determined. It is found that with the magnetizations of the FIs varying from parallel to antiparallel, there appears a topological phase transition from the anomalous quantum Hall phase to the trivial insulating one at a critical angle.

**Keywords:** topological insulator, exchange field, anomalous quantum Hall effect, edge state

**PACS:** 72.25.-b, 73.20.At, 73.50.-h, 73.43.Qt

**DOI:** 10.7498/aps.62.037202

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11174125, 11074109) and the Natural Science Foundation of Jiangsu Province, China (Grant No. BK2010364).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: scyangyy@sina.com.cn