

单轴压力下 $\text{Ge}_2\text{X}_2\text{Te}_5$ ($X = \text{Sb}, \text{Bi}$) 薄膜拓扑相变的第一性原理研究

张梅 文黎巍 丁俊 张英

First-principles study on the uniaxial pressure induced topological quantum phase transitions of $\text{Ge}_2\text{X}_2\text{Te}_5$ ($X = \text{Sb}, \text{Bi}$) thin films

Zhang Mei Wen Li-Wei Ding Jun Zhang Ying

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), 64, 107301 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.107301

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.107301>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphys.ac.cn/CN/Y2015/V64/I10>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

磁场中的拓扑绝缘体边缘态性质

[Edge mode of InAs/GaSb quantum spin hall insulator in magnetic field](#)

物理学报.2015, 64(9): 097302 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.097302>

I 掺杂金红石 $\text{TiO}_2(110)$ 面的第一性原理研究

[First-principles investigation of iodine doped rutile \$\text{TiO}_2\(110\)\$ surface](#)

物理学报.2014, 63(20): 207302 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.207302>

碳、氧、硫掺杂二维黑磷的第一性原理计算

[First-principles calculations of phosphorene doped with carbon, oxygen and sulfur](#)

物理学报.2014, 63(20): 207301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.207301>

利用同步辐射光电子能谱技术测量 ZnO/PbTe 异质结的能带带阶

[Band offsets of ZnO/PbTe heterostructure determined by synchrotron radiation photoelectron spectroscopy](#)

物理学报.2014, 63(16): 167301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.167301>

纤锌矿结构 $\text{ZnO}/\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ 量子阱中带间光吸收的尺寸效应和三元混晶效应

[Size and ternary mixed crystal effects on interband absorption in wurtzite \$\text{ZnO}/\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}\$ quantum wells](#)

物理学报.2014, 63(10): 107301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.107301>

单轴压力下 $\text{Ge}_2\text{X}_2\text{Te}_5$ ($X = \text{Sb}, \text{Bi}$) 薄膜拓扑相变的第一性原理研究*

张梅¹⁾ 文黎巍²⁾ 丁俊^{2)†} 张英^{1)‡}

1)(北京师范大学物理系, 北京 100875)

2)(河南工程学院理学院, 郑州 451191)

(2014年10月9日收到; 2014年12月15日收到修改稿)

随着拓扑绝缘体的发现, 材料拓扑物性的研究成为凝聚态物理研究的热点领域. 本文基于第一性原理计算, 研究了化合物 $\text{Ge}_2\text{X}_2\text{Te}_5$ ($X = \text{Sb}, \text{Bi}$) 的块体结构和二维单层和双层薄膜结构的拓扑物性, 以及单双层薄膜在垂直方向单轴压力下的拓扑量子相变. 研究发现, A型原子序列排列的这两种化合物都是拓扑绝缘体, 其单层薄膜都是普通金属, 而双层薄膜都是拓扑金属, 单层和双层薄膜在单轴加压过程中都没有发生拓扑量子相变; 这两种化合物的B型原子序列的晶体是普通绝缘体, 其所对应的薄膜, $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 单层是普通金属, 双层薄膜和 $\text{Ge}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ 的单层和双层薄膜均为普通绝缘体, 但是在单轴加压过程中B型原子序列所对应的单层和双层薄膜都转变为拓扑金属.

关键词: 单轴压力, 拓扑金属, 拓扑量子相变

PACS: 73.20.At, 71.20.-b, 73.43.Nq

DOI: 10.7498/aps.64.107301

1 引言

拓扑绝缘体作为一种新的量子物态, 因其丰富奇特的电子特性以及在未来电子技术中的应用前景, 近年来对其研究发展迅速, 在寻找具有更高应用价值的强拓扑绝缘体材料的同时, 许多新的拓扑物性被预言和发现, 如拓扑半金属、拓扑金属和拓扑超导体, 材料拓扑物性的研究也逐渐成为凝聚态物理研究的一个热点领域^[1-5]. 为了判断一个体系是否为拓扑绝缘体, 2005年, 宾夕法尼亚大学 Kane 和 Mele^[6] 提出可以通过计算含有时间反演对称性体系的 Z_2 拓扑数来表征一个体系的拓扑性质. 随后, Fu 和 Kane^[7] 又提出利用宇称准则来计算一个含有空间反演对称性的体系的拓扑不变量 Z_2 . 他们认为可以用一个拓扑不变量 Z_2 把具有时

间反演对称性的二维绝缘体分成两类: 一类是普通绝缘体, 对应 $Z_2 = 0$; 另一类是拓扑绝缘体, 对应 $Z_2 = 1$. 这个概念可以推广到三维时间反演不变性的绝缘体系, 这时需要用4个 Z_2 拓扑数(1个强拓扑数, 3个弱拓扑数)来描述体系的拓扑性质. 具有时间反演对称性的三维绝缘体可以分为普通绝缘体、弱拓扑绝缘体和强拓扑绝缘体这三类. 其中强拓扑绝缘体的每个方向, 其表面都有狄拉克色散形式的表面态, 在理论和实验上得到了广泛的关注. 上述理论也可以推广到拓扑金属的判断, 如果金属体系具有局域能隙, 且其拓扑数 Z_2 不为零, 就可以认为该体系为拓扑金属.

近年来有研究者指出, 晶态的 $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 在特定的层堆垛情况下可以具有拓扑绝缘体性质, 并且压力也可以在这种材料中诱导出拓扑绝缘态^[8,9]. $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 硫系化合物具有晶态和非晶态两种相,

* 国家自然科学基金(批准号: 11135001)、国家自然科学基金专项基金(批准号: 11347187) 和河南省科技攻关计划(批准号: 132102210141) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: dingjun@haue.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: yingzhang@bnu.edu.cn

两相之间在光或电的作用下可进行快速可逆转换并保持稳定,这两种状态电阻率的倍数的差别能达到1000倍甚至更高,非常适合用来制作非易失性存储器.基于硫系材料的相变存储器具有很多优点,如非易失性、读写速度快、数据保持时间长、使用寿命长、功耗低等,在高性能非易失存储器领域有非常广泛的应用前景^[10-13].拓扑绝缘态的发现更是为这类硫系化合物在量子信息计算和自旋电子学领域的应用奠定了基础.目前对该化合物的体结构性质、能带结构、拓扑性质、光学性质等已有研究^[8,9,14-19],而其二维薄膜的拓扑性质仍然未知.由于 $\text{Ge}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ 和 $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 具有相似的晶体结构,本文主要研究这两种化合物的二维单层和双层薄膜结构的电子结构和拓扑性质,同时探讨垂直薄膜方向(c 方向)单轴加压对其电子结构和拓扑性质的影响.

2 计算方法

本文的所有计算工作都是采用基于平面波赝势方法的第一性原理计算软件VASP (Vienna *ab-initio* simulation package)完成的^[20,21].计算中采用Perdew-Burke-Ernzerhof广义梯度近似描述电子之间交换关联相互作用,所用的原子赝势分别选用元素Ge的 $4s^2 4p^2$ 、元素Sb和Bi的 $5s^2 5p^3$ 、元素Te的 $5s^2 5p^4$ 的电子构型.平面波展开的截断能量为400 eV,离子弛豫的能量收敛标准小于 1×10^{-4} eV,电子弛豫的能量收敛标准小于 1×10^{-5} eV.薄膜性质的计算采用 $9 \times 9 \times 1$ 的Monkhorst-Pack的 K 点网格,为了避免相邻周期性单元之间的影响,所建的单层和双层薄膜结构的真空层都在15 Å以上.考虑到这两种化合物存在范德瓦耳斯键,而传统的密度泛函理论(DFT)不能较好地处理晶体中的范德瓦耳斯键,在做晶体结构优化与弛豫时,引入含有范德瓦耳斯力校正的DFT- D_2 方法来弛豫优化晶体结构^[22].

3 计算结果

3.1 结构弛豫

硫系化合物 $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 是一种典型的层状相变材料,其结构中包含有拓扑绝缘体 Sb_2Te_3 结构单元^[14].该类化合物在常温常压下有二种晶体结构,亚稳态的立方相和稳态的三角相.稳态结构的

晶格常数为 $a = 4.200 \text{ \AA}$, $c = 16.960 \text{ \AA}$, $\alpha = 90^\circ$, $\beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$,空间群是 $P\bar{3}m1$ ^[15].初基晶胞中含有9层原子,每层只含有一种类型的原子,原子沿着晶胞的 $[001]$ 方向依次堆垛.在这9层原子之间,不同种类原子在相邻层之间以较强的共价键结合,可以形成层错的蜂窝状六角双层格子,而同种类相邻的原子层之间由作用较弱的范德瓦耳斯键结合.由于这类化合物中含有范德瓦耳斯键,因此很容易从范德瓦耳斯键处解理,获得与之对应的层状薄膜.硫系化合物 $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 的稳态体结构含有三种不同原子堆垛序的晶体结构^[23-26],前两种分别用字母A和B表示,第三种堆垛方式可由A型和B型组合得到,其物理性质也可相应外推得到.本文只讨论A型和B型两种堆垛结构.A型晶体结构中原子的排列序列为-Te-Sb-Te-Ge-Te-Te-Ge-Te-Sb-,B型晶体结构中的原子堆垛序列为-Te-Ge-Te-Sb-Te-Te-Sb-Te-Ge-,A型与B型晶体结构的主要区别仅在于Sb原子与Ge原子互换位置.

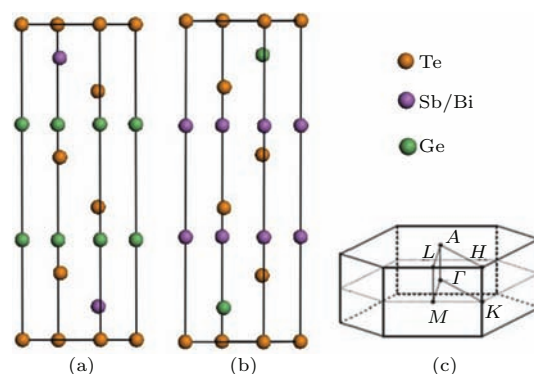


图1 (网刊彩色) 化合物 $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 和 $\text{Ge}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ 的A型晶体结构(a),B型的晶体结构(b),体结构的简约布里渊区图(c)

Fig. 1. (color online) The A type structure (a), B type structure (b) of $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ and $\text{Ge}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ compounds and the reduced Brillouin zone of bulk structure.

本文从 $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 的实验结构出发^[23,27],构造了与其对应的A型和B型晶体结构, $\text{Ge}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ 的A型晶体为实验结构,B型晶体为类比 $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 而构建.二维薄膜的构建以体结构为基础,在较弱的范德瓦耳斯键(Te-Te)处截断,获得相应的二维单层和双层薄膜,并对这些薄膜结构中的原子坐标进行优化得到其稳定的平衡结构.图1(a)和(b)分别是这两种化合物的A型、B型晶体结构示意图.在这两种化合物中,相邻原子层为相同原子的两层之间靠较弱的范德瓦耳斯键

(Te—Te) 结合, 不同种类的相邻原子层间通过较强的共价键 (Ge—Te, Sb/Bi—Te) 结合. 因此, 这类材料很容易从其较弱的范德瓦耳斯键处解离, 获得与之相对应的二维单层或多层薄膜晶体结构. 这两种化合物的二维单层、双层薄膜晶体结构与体结构相似, 具有相同的对称性, 原子沿 c 轴按 A 型或 B 型序列依次堆垛形成层状薄膜. 其中 A 型原子系列的晶体所对应的二维单层薄膜结构有 9 层原子, 原子的堆垛序列为 -Te-Ge-Te-Sb/Bi-Te-Sb/Bi-Te-Ge-Te-; 双层薄膜结构有 18 层原子, 原子的堆垛序列为 -Te-Ge-Te-Sb/Bi-Te-Sb/Bi-Te-Ge-Te-Ge-Te-Te-Ge-Te-Sb/Bi-Te-Sb/Bi-Te-Ge-Te-. 相应

地, 它的 B 型原子序列的单层和双层薄膜晶体结构, 只需把 A 型结构中的 Sb/Bi 原子与 Ge 原子互换位置. 图 1 (c) 为体结构的布里渊区, 二维薄膜结构的布里渊区为竖直方向 ($A-\Gamma$ 方向) 的俯视图. 我们对 $\text{Ge}_2\text{X}_2\text{Te}_5$ ($X = \text{Sb}, \text{Bi}$) 的体结构进行优化, 包括晶格参数和每个原子位置的优化, 获得它们的能量最低结构, 优化后得到晶格参数列于表 1. 为了对比, 我们也列出这两种化合物的实验晶格常数. 由表 1 可以看出, 计算值与实验值符合得较好, 比实验值偏大约 1%—3%, 反映出 DFT- D_2 方法很好地描述了 $\text{Ge}_2\text{X}_2\text{Te}_5$ ($X = \text{Sb}, \text{Bi}$) 化合物中的范德瓦耳斯作用.

表 1 用 DFT- D_2 方法优化的 $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 和 $\text{Ge}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ 化合物的 A, B 型体结构晶格常数
Table 1. The lattice constants of $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ and $\text{Ge}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ calculated with DFT- D_2 method.

	$\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$				$\text{Ge}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$			
	DFT- D_2		Experiments		DFT- D_2		Experiments	
	$a/\text{\AA}$	$c/\text{\AA}$	$a/\text{\AA}$	$c/\text{\AA}$	$a/\text{\AA}$	$c/\text{\AA}$	$a/\text{\AA}$	$c/\text{\AA}$
A 型	4.200	17.469	4.200	16.960	4.410	17.638	4.300	17.366
B 型	4.200	17.299	4.200	16.960	4.368	17.808		

注: $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 的 A 型和 B 型实验结构分别来自参考文献 [27] 和 [23], $\text{Ge}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ 的 A 型实验结构来自文献 [28].
Note: The A and B type structures of $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ are from Ref. [27] and [23], the A type structure of $\text{Ge}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ is from Ref. [28]

3.2 电子结构和拓扑性质

我们首先研究 $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 和 $\text{Ge}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ 这两种化合物的 A 型和 B 型体结构、二维单层和双层薄膜结构的电子结构性质. 考虑到这两种化合物中都含重元素, 计算时引入自旋轨道耦合 (SOC) 作用. 图 2 是 $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 的 A 型和 B 型的二维单层薄膜、双层薄膜、体结构的电子能带图, 其体结构的能带结构与已有的研究结果一致 [9,16]. 从图 2 中可以看到, $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 化合物的 A 型结构的能带图, 没加 SOC 作用时, 单层薄膜是有一小带隙的半导体, 引入 SOC 作用后, 带隙消失, 表现出金属性的行为; 双层薄膜不管有没有 SOC 作用时, 都是无能隙的, 表现金属性的特性; 其体结构没有 SOC 作用时, 其带隙为 0, 引入 SOC 作用后, 带隙打开. 对于 $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 化合物的 B 型原子序列的晶体, 没加 SOC 时, 二维单层薄膜、双层薄膜、体结构都有一定的带隙, 引入 SOC 作用后, 单层薄膜有能带穿过费米面, 具有金属性, 双层薄膜和体结构的能隙都比没加 SOC 作用时减小. 已有的对 $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 化合物体结构的研究表明, A 型序列的三维晶体

是拓扑绝缘体, B 型序列的三维晶体是普通的绝缘体 [8]. 我们的计算结果中 A 型序列的体结构存在 SOC 作用打开的能隙, 也预示着拓扑绝缘相可能存在. 图 3 是 $\text{Ge}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ 化合物的 A 型和 B 型的二维单层薄膜, 双层薄膜, 体结构的电子能带结构图, 其能带变化规律和 $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 相似, 不再赘述.

为了研究体系的拓扑性质, 我们采用 Kane 的计算方法, 分别计算这两种化合物相应体结构, 单层和双层薄膜结构的 Z_2 拓扑数 [29]. $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 的 A 型序列的晶体, 体结构的 Z_2 为 (1 : 000), 对应拓扑绝缘体, 与已有计算结果完全一致; 二维单层结构的 Z_2 为 0, 对应普通金属; 二维双层结构的 Z_2 为 1, 但是在它的能带图 2 (c) 中, 没有全局能隙, 只有局域能隙, 因此对应为拓扑金属. 这里, 拓扑绝缘体与拓扑金属的区别在于, 拓扑绝缘体具有全局能隙, 而拓扑金属的能隙是局域的. 同样, 其 B 类型序列的晶体, 体结构的 Z_2 为 (0 : 000), 对应普通绝缘体; 二维单层和双层薄膜结构的 Z_2 都是 0, 分别对应普通金属和普通绝缘体. 图 3 是 $\text{Ge}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ 化合物的 A 型和 B 型的二维单层薄膜、

双层薄膜、体结构的电子能带图, 我们也计算了 $\text{Ge}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ 化合物的二维单层、双层薄膜和体结构的拓扑数, 发现该化合物的 A 型序列的晶体, 体结构的 Z_2 为 (1 : 000), 对应拓扑绝缘体; 二维单层结

构的 Z_2 为 0, 对应普通金属; 二维双层结构的 Z_2 为 1, 对应拓扑金属; 其 B 型序列的晶体, 体结构的 Z_2 为 (0 : 000), 对应普通绝缘体; 二维单层和双层结构的 Z_2 也都是 0, 对应普通绝缘体。

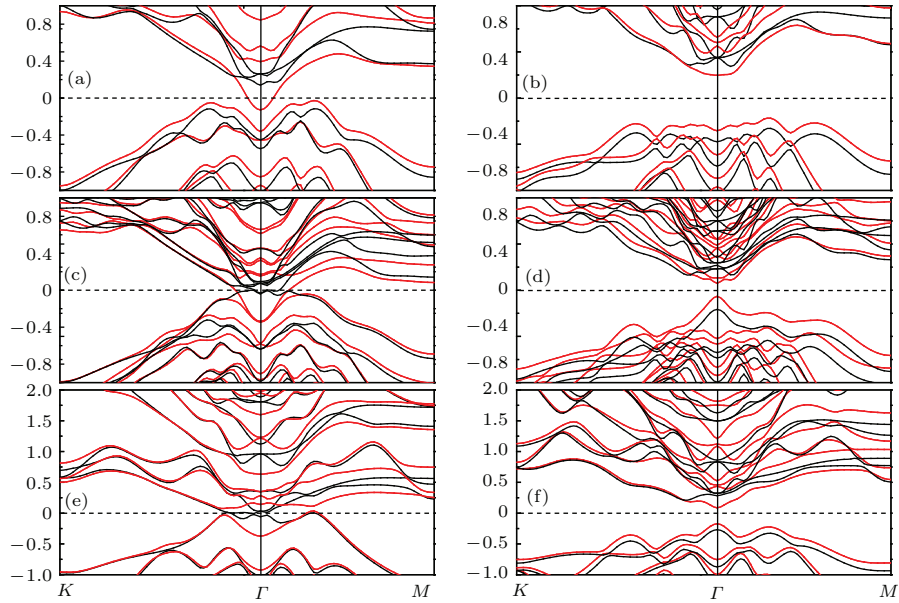


图2 (网刊彩色) $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 的二维单层薄膜、双层薄膜、体结构的能带结构 (a), (c), (e) 图是 A 型原子序列的单层薄膜、双层薄膜、体结构的能带结构; (b), (d), (f) 图是 B 型原子序列的单层薄膜、双层薄膜、体结构的能带结构; 图中黑色曲线是没加 SOC 作用, 红色曲线是加了 SOC 作用, 其中纵坐标表示能量, $E_F = 0$ eV

Fig. 2. (color online) The band structure of monolayer, bilayer and bulk structure of $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$: (a), (c) and (e) corresponding to monolayer, bilayer and bulk structure of A type crystal; (b), (d) and (f) are the same for B type crystal. The red and black bands are calculated with and without SOC respectively, the Fermi level is set to zero.

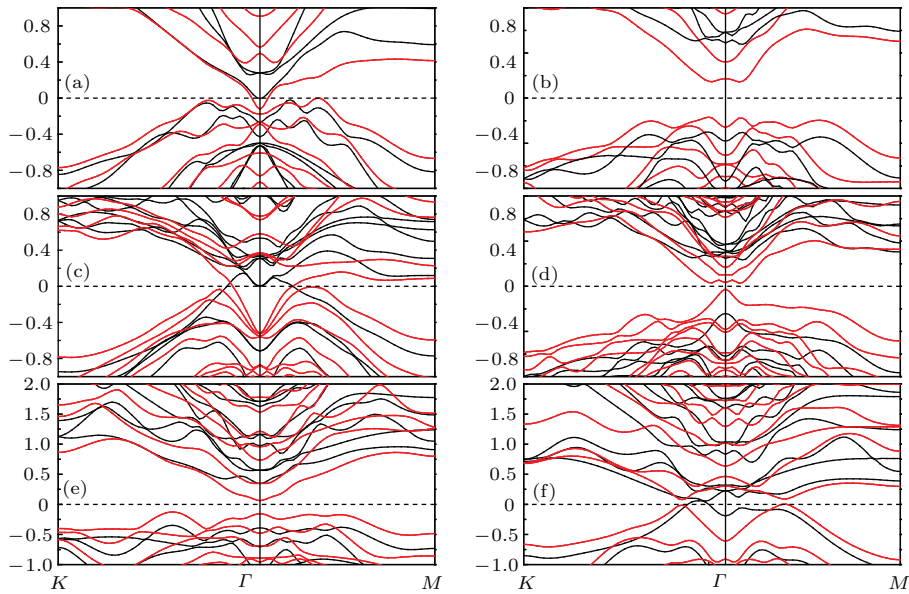


图3 (网刊彩色) $\text{Ge}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ 的单层薄膜、双层薄膜、体结构的能带结构 (a), (c), (e) 图是 A 型原子序列的单层薄膜、双层薄膜、体结构的能带结构; (b), (d), (f) 图是 B 型原子序列的单层薄膜、双层薄膜、体结构的能带结构; 图中黑色曲线是没加 SOC 作用, 红色曲线是加了 SOC 作用, 其中纵坐标表示能量, $E_F = 0$ eV

Fig. 3. (color online) The band structure of monolayer, bilayer and bulk structure of $\text{Ge}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$: (a), (c) and (e) corresponding to monolayer, bilayer and bulk structure of A type crystal; (b), (d) and (f) are the same for B type crystal. The red and black bands are calculated with and without SOC respectively, the Fermi level is set to zero.

3.3 c方向单轴加压对其拓扑物性的影响

研究发现, 虽然 $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ B 序列的体结构是普通绝缘体, 但给其加压或掺杂, 可以使其转变成拓扑绝缘体^[8,9], 也就说在加压的过程中, 发生了从普通绝缘体到拓扑绝缘体的拓扑量子相变^[30-33]. 我们把发生拓扑相变的这一压强称为临界压强 P_C , 当 $P < P_C$ 时, 体系是普通的绝缘体, 当 $P \geq P_C$ 时, 体系是拓扑绝缘体/金属. 一个体系发生拓扑量子相变有三个标志: 1) 在发生拓扑相变时, 体系的带隙闭合, 也就是说, 当压强达到临界压强时, 体系的能隙消失; 2) 当压强 $P \geq P_C$, 布里渊区中时间反演不变点处导带和价带的轨道成分交换, 形成反带结构; 3) 在拓扑相变前后, 它们的 Z_2 拓扑不变量的值不相同. 本文中, 我们比较关心的是这两种化合物的二维晶体结构在加压下是否会发生拓扑量子相变. 首先, 研究和讨论 $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 化合物的 B 型

原子序列所对应的二维单层和双层薄膜晶体结构在单轴加压下, 不同压缩强度下其电子结构性质的变化. 图 4 是 $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 的 B 型原子序列所对应的单层薄膜在不同压缩强度下的电子能带结构图. 图上方的负号表示压缩, 大小表示压缩 c 轴的百分比, 其中上半部分是没加 SOC 的情况, 下半部分是加了 SOC 的情况. 随着压缩强度的增加, 体系的带隙慢慢减小, 没加 SOC 压缩为 3% 时, 带隙减小为 0, 继续增大压力即转变为金属; 而考虑 SOC 后, 压缩 3% 时已经转变为金属态, 由此可见单层薄膜在加压过程中发生了由绝缘体变到金属的转变. 图 5 是 $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 的 B 型原子序列所对应的双层薄膜结构在不同压缩强度下的电子能带结构图. 同单层结构的能带变化类似, 随着压缩强度增加也发生了由绝缘体到金属的转变. 需要注意的是单层或双层薄膜在压缩到 8% 时仍然具有非常小的局域能隙.

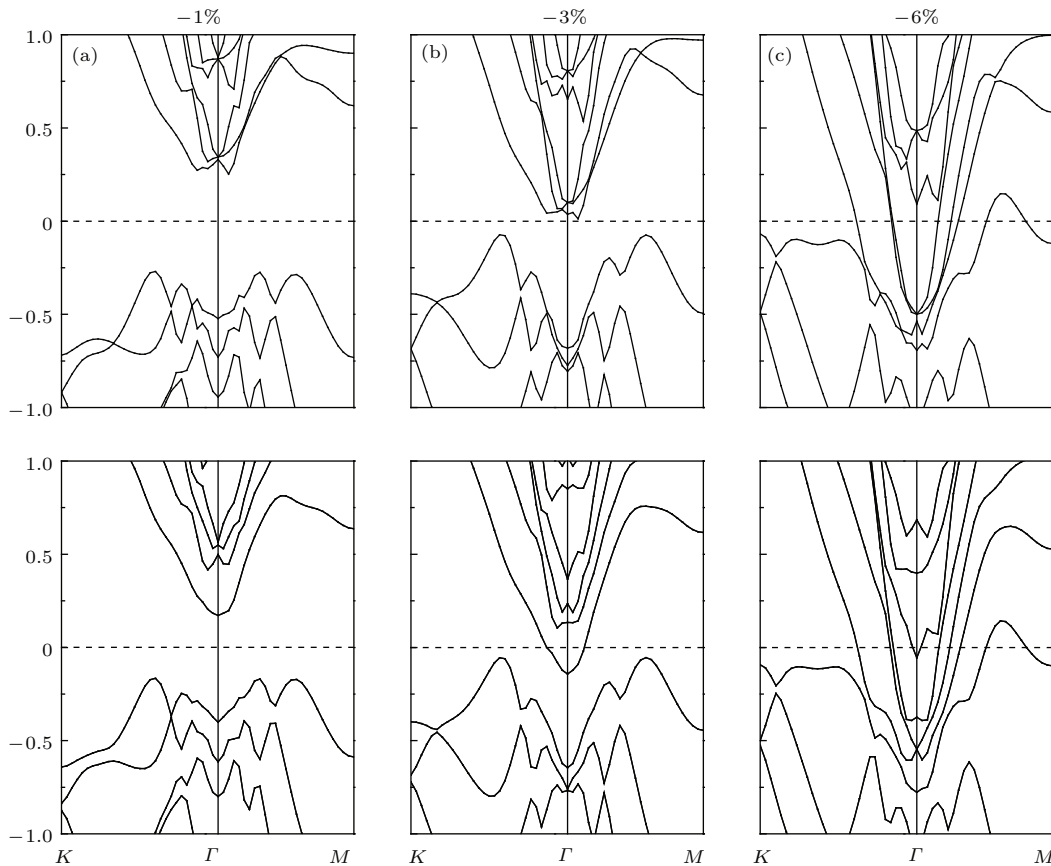


图 4 $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 化合物 B 类型单层薄膜结构在 c 方向不同的压缩强度下的能带图 (a), (b), (c) 的上半部分表示没加 SOC 的情况, 下半部分表示引入 SOC 作用的情况, 其中纵坐标表示能量, $E_F = 0$ eV
 Fig. 4. The band structure of B type $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ monolayer film under different compression which along c axis. The upper part of (a), (b) and (c) are calculated without SOC while the lower part are calculated with SOC, the Fermi level is set to zero.

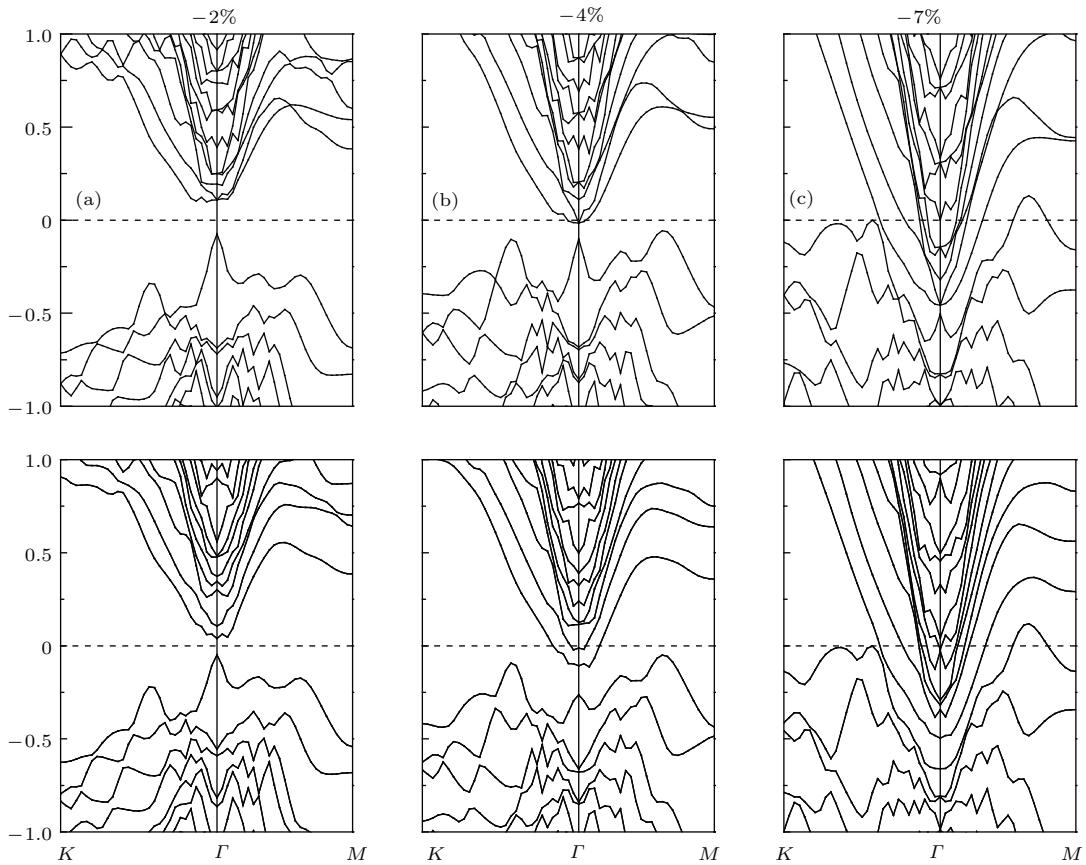


图5 $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 化合物B类型双层薄膜结构在 c 方向不同的压缩强度下的能带图 (a), (b), (c) 的上半部分表示没加 SOC 的情况, 下半部分表示引入 SOC 作用的情况, 其中纵坐标表示能量, $E_F = 0 \text{ eV}$

Fig. 5. The band structure of B type $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ bilayer film under different compression which along c axis. The upper part of (a), (b) and (c) are calculated without SOC while the lower part are calculated with SOC, the Fermi level is set to zero.

为了进一步分析体系的拓扑性是否发生了变化, 我们也计算了这两种化合物的拓扑不变量 Z_2 . 因为这两个晶格体系具有空间反演对称性, 我们采用前面提到的宇称法则, 计算了各个时间反演不变点的波函数宇称, 根据公式 $(-1)^{Z_2} = \prod_{i=1}^b \delta_i$ 得到体系的拓扑不变量 Z_2 . 表 2 列出了 $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 化合物的 B 原子序列所对应的二维单层和双层薄膜结构在单轴加压、不同的压缩情况下, 这四个时间反演不变点的宇称值和拓扑不变量 Z_2 的数值. 从表 2 中可以看出, $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 的 B 型序列的二维单层薄膜结构, 在压缩到 6% 后, 其拓扑不变量 Z_2 由原来的 0 变到 1, 在临界压缩强度前后, 拓扑不变量 Z_2 的数值不一样, 结合前面图 2 中的能隙变化, 我们可以得出结论, 在压缩过程发生了从普通绝缘体到金属再到拓扑金属的量子相变; 其双层薄膜结构压缩到 4% 之后, 其拓扑不变量 Z_2 也由原来的 0 变到 1, 同样发生了向拓扑金属相的转变. 采用类似的方法, 我们也计算了 $\text{Ge}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ 的 B 型原

子序列所对应的二维单层和双层晶体结构在单轴加压下, 不同压缩强度下各结构的电子能带结构和时间反演不变点处的宇称值, 以及总的拓扑不变量 Z_2 , 也发现加压使 $\text{Ge}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ 的 B 型原子序列的发生拓扑量子相变. 对其二维单层晶体结构, 当压缩到 6% 之后, 其拓扑不变量 Z_2 由原来的 0 变到 1; 对其双层晶体结构, 压缩到 5% 之后, 其拓扑不变量 Z_2 也由原来的 0 变到 1. 之后我们分别计算了 $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 和 $\text{Ge}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ 的 A 型序列的二维单层和双层晶体结构在不同的压缩强度下其电子结构和物性的变化. 图 6 给出了这两化合物的 A 和 B 型晶体的单层和双层结构在单轴加压下的 Z_2 值的变化. 从图 6 (a) 和 (b) 可以看到, 这两种化合物的 A 型原子序列所对应的二维单层晶体结构, 从压缩 1% 到 8% 的这个过程中, 其拓扑不变量始终都是 0, 表现普通金属的特性; 同样, 对双层结构也从 1% 压缩到 8%, 各种压缩状态下, 它们的拓扑不变量始终都是 1, 表现拓扑金属的特性. 也就是说, 这两化合

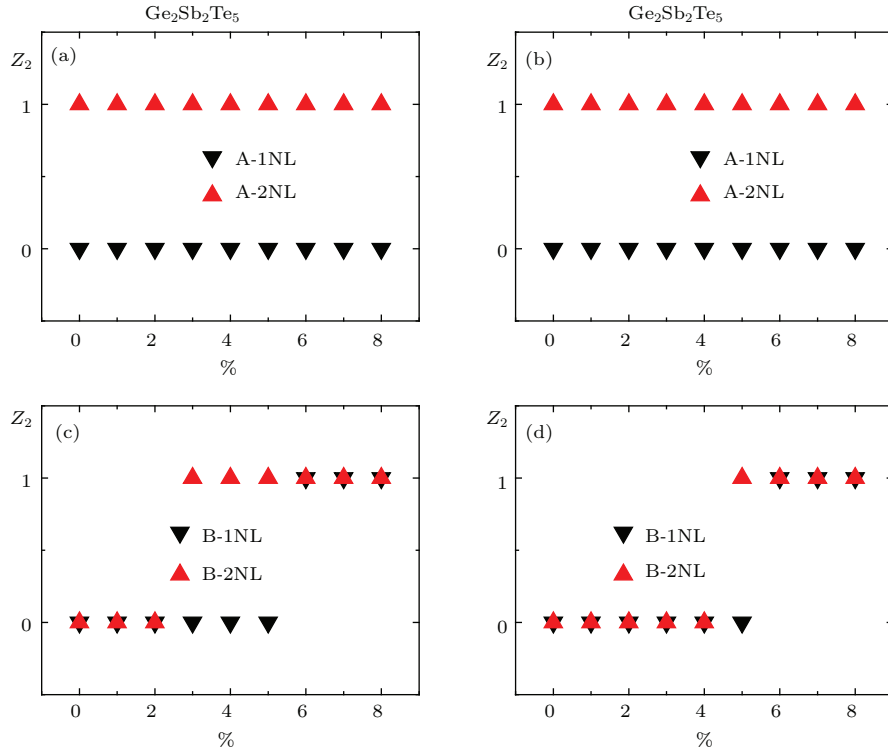


图6 (网刊彩色) 不同的压缩情况下的两化合物 Z_2 值的变化 (a), (c) 分别是 $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 的 A 型、B 型晶体薄膜结构的 Z_2 变化; (b), (d) 分别是 $\text{Ge}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ 的 A 型、B 型晶体薄膜结构的 Z_2 变化; 其中黑色的三角表示单层薄膜结构, 红色的三角表示双层薄膜结构

Fig. 6. (color online) Z_2 of the two compounds under different compression: (a) and (c) corresponding to A and B type films of $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$, while (b) and (d) corresponding to A and B type films of $\text{Ge}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$, respectively. The black triangle indicates monolayer and red triangle indicates bilayer.

表2 $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 的 B 原子序列的二维单层 (1NL)、双层 (2NL) 结构在不同压缩强度下, 每个时间反演不变点处的宇称值和总的拓扑不变量 Z_2 值. 其单层 (1NL) 压缩到 5% 时的 Z_2 拓扑不变量的值是 0, 6% 时的 Z_2 拓扑不变量的值是 1; 其双层 (2NL) 压缩到 3% 时的 Z_2 拓扑不变量的值是 0, 4% 时的 Z_2 拓扑不变量的值是 1, 其中 0 和 1 分别表示普通绝缘体和拓扑金属

Table 2. The parity at every time reversal point and Z_2 of monolayer and bilayer film of B type $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ under different compression. The Z_2 of monolayer is 0 under 5% compression while turn to be 1 under 6% compression. The Z_2 of bilayer is 0 under 3% compression while turn to be 1 under 4% compression. Z_2 is 0 or 1 corresponding to conventional insulator and topological insulator, respectively.

	1NL					2NL				
	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	Z_2	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	Z_2
-2%	-1	-1	-1	-1	0	-2%	+1	+1	+1	0
-3%	-1	-1	-1	-1	0	-3%	+1	+1	+1	0
-4%	-1	-1	-1	-1	0	-4%	-1	+1	+1	1
-5%	-1	-1	-1	-1	0	-5%	-1	+1	+1	1
-6%	+1	-1	-1	-1	1	-6%	-1	+1	+1	1

物的 A 型晶体的二维单层和双层结构, 在单轴压缩至 8% 的过程中都没有发生拓扑量子相变, 而加压对 B 类型结构的单层和双层结构物性的影响较大. 图 6(c) 和 (d) 分别是 $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 和 $\text{Ge}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ B 型结构的单层和双层薄膜的拓扑数 Z_2 随压缩强度的变化, 在不同的压缩强度下均发生了向拓扑金属相的转变.

4 结 论

本文主要讨论和研究了 $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 和 $\text{Ge}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ 这两种化合物的二维薄膜结构的相关性质. 首先, 研究了它们的块体晶体结构, 分别计算了 A 型和 B 型原子堆垛结构的单层和双层晶体能带结构和拓扑性质; 其次, 研究了加压对其单层和双层结构电子结构及拓扑性质的影响. 所得结论如下: 1) 对于这两种化合物的 A 型原子堆垛序列的单层薄膜结构, 没加 SOC 时是有带隙的半导体, 引入 SOC 作用后表现为金属特性, 其拓扑数是 0, 对应普通金属; 其双层薄膜结构, 不管有没有 SOC

作用时, 它们都表现为无能隙的金属性特征, 拓扑数为1, 对应拓扑金属; 对 $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 的 B 型原子堆垛序列的结构, 没加 SOC 时, 单层和双层薄膜都有一定的带隙, 引入 SOC 作用后, 单层变为金属态, 双层带隙有所减小, 其拓扑数都是 0, 分别对应普通金属和普通绝缘体; 对 $\text{Ge}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ 的 B 序列的二维单双层薄膜和体结构, 不管加不加 SOC 作用都有能隙, 其拓扑不变量 $Z_2 = 0$, 对应普通绝缘体; 2) 研究了 c 方向单轴加压对这两种化合物 A 型和 B 型原子堆垛序列的单层和双层薄膜结构物性的影响, 这两种化合物的 A 型原子堆垛序列的单层和双层薄膜在加压过程中并没有拓扑量子相变产生, 而 B 型原子堆垛序列的结构在压缩的过程中发生了拓扑量子相变。

感谢北京理工大学姚裕贵教授的指导和讨论。

参考文献

- [1] Zhang H J, Liu C X, Qi X L, Dai X, Fang Z, Zhang S C 2009 *Nature Phys.* **5** 438
- [2] Feng W X, Xiao D, Ding J, Yao Y G 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 016402
- [3] Weng H M, Xu G, Zhang H J, Zhang S C, Dai X, Fang Z 2011 *Phys. Rev. B* **84** 060408
- [4] Xu G, Weng H M, Wang Z J, Dai X, Fang Z 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 186806
- [5] Marcinkova A, Wang J K, Slavonic C, Andriy H N, Kelly K F, Filinchuk Y, Morosan E 2013 *Phys. Rev. B* **88** 165128
- [6] Kane C L, Mele E J 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 146802
- [7] Fu L, Kane C L 2007 *Phys. Rev. B* **76** 045302
- [8] Kim J, Kim J, Jhi S H 2010 *Phys. Rev. B* **82** 201312(R)
- [9] Sa B S, Zhou J, Song Z, Sun Z, Ahuja R 2011 *Phys. Rev. B* **84** 085130
- [10] Sun Z, Zhou J, Pana Y, Songc Z, Maod H K, Ahuja R 2011 *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **108** 10410
- [11] Lai Y F, Feng J, Qiao B W, Ling Y, Lin Y Y, Tang T A, Cai B C, Chen B M 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 4347 (in Chinese) [赖云峰, 冯洁, 乔保卫, 凌云, 林殷茵, 汤庭鳌, 蔡炳初, 陈邦明 2006 物理学报 **55** 4347]
- [12] Liao Y B, Xu L, Yang F, Liu W Q, Liu D, Xu J, Ma Z Y, Chen K J 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 6563 (in Chinese) [廖远宝, 徐岭, 杨菲, 刘文强, 刘东, 徐骏, 马忠元, 陈坤基 2010 物理学报 **59** 6563]
- [13] Pirovano A 2004 *IEEE Trans. Electron Dev.* **51** 3
- [14] Juarez L F, Da S, Aron W, Lee H 2008 *Phys. Rev. B* **78** 224111
- [15] Kaewmaraya T, Ramzan M, Löfås H, Ahuja R 2013 *J. Appl. Phys.* **113** 033510
- [16] Sa B S, Zhou J, Sun Z M, Tominaga J, Ahuja R 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 096802
- [17] Park J H, Eom S H, Lee H 2009 *Phys. Rev. B* **80** 115209
- [18] Kim K H, Kyoung Y K, Yun D J, Choi S J 2013 *Thin Solid Films* **548** 40
- [19] Sa B S, Zhou J, Ahuja R, Sun Z 2014 *Computat. Mater. Sci.* **82** 66
- [20] Kresse G, Hafner J 1993 *Phys. Rev. B* **47** 558
- [21] Kresse G, Furthmüller J 1996 *J. Comput. Mater. Sci.* **6** 15
- [22] Grimme S 2006 *J. Comput. Chem.* **27** 1787
- [23] Petrov I I, Immoov R M, Pinker Z G 1968 *Sov. Phys. Crystallogr.* **13** 339
- [24] Kooi B J, de Hossona J Th M 2002 *J. Appl. Phys.* **92** 3584
- [25] Sun Z M, Zhou J, Ahuja R 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 055507
- [26] Lee G, Jhi S H 2008 *Phys. Rev. B* **77** 153201
- [27] Kooi B J, de Hossona J Th M 2002 *J. Appl. Phys.* **92** 3584
- [28] Matsunaga T, Kojima R, Yamada N, Kifune K, Kubota Y, Takata M 2007 *Acta Cryst.* **B63** 346
- [29] Yu R, Zhang W, Weng H M, Dai X, Fang Z 2011 *Physics* **40** 7 (in Chinese) [余睿, 张薇, 翁红明, 戴希, 方忠 2011 物理 **40** 7]
- [30] Li W, Wei X Y, Zhu J X, Ting C S, Chen Y 2014 *Phys. Rev. B* **89** 035101
- [31] Zhu Z Y, Cheng Y, Schwingenschlögl U 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 266805
- [32] Zhang Q Y, Cheng Y, Schwingenschlögl U 2013 *Phys. Rev. B* **88** 155317
- [33] Singh B, Lin H, Prasad R, Bansil A 2013 *Phys. Rev. B* **88** 195147

First-principles study on the uniaxial pressure induced topological quantum phase transitions of $\text{Ge}_2\text{X}_2\text{Te}_5$ ($\text{X} = \text{Sb}, \text{Bi}$) thin films*

Zhang Mei¹⁾ Wen Li-Wei²⁾ Ding Jun^{2)†} Zhang Ying^{1)‡}

1) (Department of Physics, Beijing Normal University, Beijing 100875, China)

2) (College of Science, Henan Institute of Engineering, Zhengzhou 451191, China)

(Received 9 October 2014; revised manuscript received 15 December 2014)

Abstract

Since the topological insulator was discovered, the investigation of topological properties has become the hot spot in condensed matter physics. In this paper, we study topological properties of chalcogenide compounds $\text{Ge}_2\text{X}_2\text{Te}_5$ ($\text{X} = \text{Sb}, \text{Bi}$) crystals and their monolayer and bilayer films as well as the vertical uniaxial pressure induced topological quantum phase transitions in monolayer and bilayer films. The results show that for A-type crystal, the bulk structures of these two compounds are topological insulators, the monolayer structures of these two compounds are conventional metals, and bilayer structures are topological metals. There is no topological quantum phase transition in monolayer nor bilayer film under the uniaxial compression. While for B-type crystal, the bulk structures of these two compounds are conventional insulators, the monolayer $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ is conventional metal, its bilayer structure as well as monolayer and bilayer of $\text{Ge}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ films is conventional insulator. All the B-type monolayer and bilayer films each undergo a topological quantum phase transition to the topological metals under the uniaxial compression.

Keywords: uniaxial pressure, topological metal, topological quantum phase transition

PACS: 73.20.At, 71.20.-b, 73.43.Nq

DOI: 10.7498/aps.64.107301

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11135001), the Special Funds of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11347187), and the Key Science and Technology Program of Henan Province, China (Grant No. 132102210141).

† Corresponding author. E-mail: dingjun@haue.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: yingzhang@bnu.edu.cn