

专题: 庆祝南京大学物理学科成立100周年

磁场中的拓扑绝缘体边缘态性质*

王青¹⁾ 盛利^{1)2)†}

1)(南京大学物理系和固体微结构物理国家重点实验室, 南京 210093)

2)(人工微结构科学与技术协同创新中心, 南京 210093)

(2014年12月30日收到; 2015年2月22日收到修改稿)

用数值方法研究了拓扑绝缘体薄膜体系在外加垂直磁场作用下其边缘态的性质. 磁场的加入通过耦合 $\mathbf{k} + e\mathbf{A}$, 即 Peierls 势替换关系和该作用导致的 Zeeman 交换场体现在哈密顿量中. 考虑窄条圆环状结构的二维 InAs/GaSb/AlSb 薄膜量子阱材料, 当其处于拓扑非平庸状态, 即量子自旋霍尔态时, 会出现受时间反演对称性保护的两支简并边缘态, 而在垂直磁场的作用下, 时间反演对称性被破坏, 这时能带将形成一条条的朗道能级, 原来简并的两支边缘态也会分开到朗道能级谱线的两侧, 从电子态密度的空间分布情况则可以看到边缘态分别局域在材料的两个边界. 随着磁场的增大, 位于同一边界上的不同自旋极化的边缘态将出现分离: 一支仍然局域在边缘, 另一支则随外加磁场的增加而有逐渐演化到材料内部的趋势. 文中还计算了同一边界上的两支边缘态之间的散射, 结果表明由于两个边缘态在空间发生分离, 相互之间的散射被很大的压制, 得到了其散射随磁场增加没有明显变化的结论, 所以磁场并不会增强散射过程, 也没有破坏体拓扑材料的性质, 说明了量子自旋霍尔态在没有时间反演对称的情况下也可以有较强的稳定性.

关键词: 拓扑绝缘体, 量子自旋霍尔态, 朗道能级, 边缘态

PACS: 73.20.At, 73.43.-f, 73.63.Hs

DOI: 10.7498/aps.64.097302

1 引言

量子霍尔效应^[1]是指二维电子气在低温强磁场中电子能谱形成分立的朗道能级, 并且当电子费米能处于朗道能级之间的能隙中时, 体系便会呈现量子化整数霍尔电导率的现象, 这时在材料边缘也会存在手征的边缘态: 电子在一个边的边缘只朝一个方向运动. 手性边缘态提供了一个理想的导电通道, 电子通过它的传播是无能量耗散的, 即不会产生焦耳热. 另一方面, 体系的边缘态霍尔电导也直接跟块体能带结构有关: 即块体如果存在一个绝缘带隙, 且不改变块体的这种能带结构(主要是指带隙是否封闭或重新打开), 那么这种量子化的霍尔电导将保持不变, 并且可以用拓扑量 Chern 数(绕数, 或 TKNN 量子数^[2])直接描述, 也可以说边缘电流是由块体的拓扑性质保护的. 量子霍尔效应

并非只能在磁场下才能发生, 比如 Haldane 模型^[3]就是一个定义在具有交错磁通和 AB 子格交错势的二维六角格子的无自旋电子模型, 这个模型拥有量子化的整数霍尔电导跟与之对应的拓扑量, 并且也会在开边界形成手征边缘态, 但是没有外加磁场, 因而首次实现了无朗道能级的量子霍尔效应, 也被称为量子反常霍尔效应.

最近, 一个新的研究方向: 拓扑绝缘体^[4,5], 引起了人们越来越广泛的关注. 拓扑绝缘体是一种全新的物质状态, 从能带的图像上来理解, 拓扑绝缘体是一种内部具有体能隙(绝缘态), 而表面(或边缘)存在无能隙金属态的绝缘体材料. 其表面态(边缘态)是由自旋轨道耦合导致的受时间反演对称性保护的金属态, 因此可以避免非磁性杂质散射, 非拓扑形变不会改变该性质, 其中二维情形下的拓扑绝缘体, 也被称为量子自旋霍尔效应, 可以看

* 国家科技部重点基础研究发展计划(批准号: 2015CB921202, 2014CB921103)和国家自然科学基金(批准号: 11225420)资助课题.

† 通信作者. E-mail: shengli@nju.edu.cn

做是量子霍尔效应的推广. 这一概念提出不久后, Bernevig, Hughes 和 Zhang^[6] 预言在 HgTe 量子阱中可能观察到这种效应, 在随后的实验中^[7] 得到证实. 与量子霍尔效应的手性边缘态不同, 量子自旋霍尔态的边缘模式被称为螺旋边缘态, 对于边缘态上的两种自旋, 具有相反的手征性. 也就是说, 自旋向上的电子和自旋向下的电子沿着相反的方向传导, 且数目相等, 因此存在净的自旋流. 这个重要特征是因为体系具有比较强的自旋-轨道耦合, 其作用类似于一个与自旋相关的磁通和电子轨道动量之间的耦合. 理想的情况下, 即当电子自旋守恒时, 一个量子自旋霍尔体系的两个自旋组分的运动情况就像是两个独立的无朗道能级的量子霍尔体系, 每个边界有两支携带不同自旋的边缘态相向运动, 无序的存在也无法改变它的传播. 在一个时间反演对称的量子自旋霍尔体系中, 同一边缘上两个相向运动的边缘态自旋极化处处相反, 因而任何非磁杂质散射无法导致两个边缘态之间的背散射, 确保了边缘态输运的无耗散特性, 这种拓扑保护源自于材料的时间反演对称性, 只要保证体系的时间反演对称性不被破坏并且体能带带隙依然存在, 则自旋流可以无耗散地在量子自旋霍尔样品的边缘上传导^[4,8]. 但是, 在这种情况下, 由于总霍尔电导率为零, 不能用传统的第一陈数描写, 需要用一种新的拓扑不变量, 即 Z_2 拓扑数^[9-11] 或者自旋陈数^[12-15] 来刻画, Z_2 拓扑数表示了无能隙边缘态的 Kramers 对的个数, 因而是受时间反演对称性保护的, 在破坏时间反演对称性的情况下将无法适用; 自旋陈数也是一种描述拓扑性质的不变量, 可由自旋依赖的边界相位计算得到, 之后 Prodan^[16] 重新定义了自旋陈数, 使得解析计算更为方便. 即自旋陈数受体能隙和体的自旋谱隙保护而与对称性无关, 所以在破坏时间反演对称性的系统中仍然是适用的. 这些拓扑不变量将具有量子自旋霍尔效应的绝缘体和普通的绝缘体区分开来.

近来有实验也表明当时间反演对称性被破坏时, 量子自旋霍尔效应仍然可以是稳定的^[17], 该实验中使用砷化铟/锑化铟(InAs/GaSb/AlSb)量子阱材料, 在加入时间反演对称性的垂直磁场并逐渐增加到 8 T 的过程中, 材料并没有发生相变, 表明了量子自旋霍尔态存在的条件是可以更加广泛的. 本文将选用砷化铟/锑化铟(InAs/GaSb/AlSb)量子阱作为研究对象, 该材料具有倒转能带结构,

通过调节材料的尺寸和其他一些参数, 该拓扑绝缘体薄膜系统可以成为拓扑平庸或非平庸的绝缘体. 实验上, 通过增加其厚度达到一定值, 使系统发生相变: 从能隙闭合的绝缘体态到半金属相, 同时经过自旋耦合机理打开能隙, 实现量子自旋霍尔态. 本文将以此为基础, 加入破坏时间反演对称的磁场项, 以此研究量子自旋霍尔态在时间反演对称破坏的情况下其边缘态的相关性质.

2 BHZ 模型

2.1 理论模型

二维 InAs/GaSb/AlSb 薄膜量子阱的量子自旋霍尔效应可以用一个比较简单的等效理论模型来描述. 从文献^[6]提出的 BHZ 模型出发, 其有效哈密顿量是一个描述四能带结构的 4×4 矩阵, 由三部分构成, 基矢为自旋和轨道直积空间的四个矢量: $|e, \uparrow\rangle$, $|h, \uparrow\rangle$, $|e, \downarrow\rangle$ 和 $|h, \downarrow\rangle$. 我们对哈密顿量在长波近似下, 在 Γ 附近对波矢 $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ 展开到 k 的二次形式可以得到

$$H = H_0 + H_{\text{BIA}} + H_{\text{SIA}}. \quad (1)$$

其中,

$$H_0 = \epsilon(k)\mathbf{I}_{4 \times 4} + \begin{pmatrix} \mathcal{M}(k) & Ak_+ & 0 & 0 \\ Ak_- & -\mathcal{M}(k) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathcal{M}(k) & -Ak_- \\ 0 & 0 & -Ak_+ & -\mathcal{M}(k) \end{pmatrix}, \quad (2)$$

$\mathbf{I}_{4 \times 4}$ 为 4×4 单位矩阵, $\epsilon(k) = C_0 + C_2k^2$, $\mathcal{M}(k) = M_0 - M_2k^2$ 是二阶展开的质量项, 上下能带间的能隙为 $2M_0$, 能带的曲率由 M_2 描述, 当 $M_0 \cdot M_2 < 0$ 时, 材料为拓扑平庸状态; 当 $M_0 \cdot M_2 > 0$ 时, 材料为拓扑非平庸状态, 而拓扑非平庸的能带结构会导致材料边界上产生具有螺旋手征性的边缘态. 在考虑到实际材料的厚度会对模型参数造成一定影响, 标记为体不对称 BIA^[18] 项, 表示为

$$H_{\text{BIA}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \Delta_e k_+ & -\Delta_0 \\ 0 & 0 & \Delta_0 & \Delta_h k_- \\ \Delta_e k_- & \Delta_0 & 0 & 0 \\ -\Delta_0 & \Delta_h k_+ & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

其中 $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$, 最后考虑结构反演不对称 SIA 项^[19] 为

$$H_{IA} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i\xi_e k_- & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -i\xi_e^* k_+ & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4)$$

其中的 Δ_h , Δ_e , Δ_0 , ξ_e 参数皆依赖于材料的物理性质.

为了更加清楚的描述这一模型在磁场下的性质, 现在只考虑主要哈密顿量 H_0 , 并解析求解此种情况下的能谱以及加入磁场后朗道能级的性质, 而具体带入材料参数, 并考虑哈密顿量 H_{BIA} 跟 H_{SIA} 的情况将在后文的数值求解部分中详细给出. 模型的主要哈密顿量 H_0 可以被严格对角化, 并求得两支简并的能带

$$E_s^{\pm}(k) = \epsilon(k) + s\sqrt{\mathcal{M}^2(k) + A^2k^2}, \quad (5)$$

$s = +1(-1)$ 标记了导带价带指标, 能量 E 上的 \pm 则代表了自旋分量, 此时自旋处在简并状态. 若考虑外加磁场 \mathbf{B} , 加入矢势形式的轨道磁场 $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$, 则有

$$\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} - \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}. \quad (6)$$

定义梯子算符:

$$a_k^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{y - y_0}{l_B} - l_B \partial_y \right), \quad (7)$$

$$a_k = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{y - y_0}{l_B} + l_B \partial_y \right). \quad (8)$$

其中 $y_0 = l_B^2 k_x$, $l_B = \sqrt{\frac{\hbar c}{eB}} \simeq \frac{25}{\sqrt{B(\text{T})}} (\text{nm})$ 为磁长度. 将梯子算符带入哈密顿量最后可得

$$H_0(a, a^{\dagger}) = \begin{pmatrix} \mathcal{X}_{11} & \eta a^{\dagger} & 0 & 0 \\ \eta a & \mathcal{X}_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathcal{X}_{33} & 0 \\ 0 & 0 & \eta a^{\dagger} & \mathcal{X}_{44} \end{pmatrix}, \quad (9)$$

$$\mathcal{X}_{11} = (\omega_2 - \omega_1) \left(a^{\dagger} a + \frac{1}{2} \right) - M_0,$$

$$\mathcal{X}_{22} = (\omega_2 + \omega_1) \left(a^{\dagger} a + \frac{1}{2} \right) + M_0,$$

$$\mathcal{X}_{33} = (\omega_2 + \omega_1) \left(a^{\dagger} a + \frac{1}{2} \right) + M_0,$$

$$\mathcal{X}_{44} = (\omega_2 - \omega_1) \left(a^{\dagger} a + \frac{1}{2} \right) - M_0.$$

此时哈密顿量对应的本征向量为

$$(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \varphi_4) \\ = (|e \uparrow, n-1\rangle, |h \downarrow, n-1\rangle, |h \uparrow, n\rangle, |e \downarrow, n\rangle)$$

相应的朗道能级表达式为

$$E_{n,s}^{\pm} = \frac{1}{2} \left[\pm \omega_1 + 2n\omega_2 \right. \\ \left. + s\sqrt{(\omega_2 \pm 2(M_0 + n\omega_1))^2 + 4n\eta^2} \right], \quad (10)$$

其中 $\eta = -\sqrt{2}A/l_B$, $\omega_1 = -2M_2/l_B$ 和 $\omega_2 = -2C_2/l_B$. n 为整数, 当磁场 B 为零时, 上式退化为简并的能量表达式(5)式, 而非零磁场会造成朗道能级的劈裂, 后面的数值计算结果也会看到, 交换场会使能带原来简并的自旋部分劈裂, 但体能隙保持的非常完整, 当费米面处在体能隙中间时, 交叉的边缘态谱线从体态中伸展出来跨越能隙与处在能隙中的费米面相交, 分别贡献量子自旋霍尔电导, 并且在较大范围磁场的情况下, 该性质也非常稳定^[20-22].

2.2 讨论

这部分我们将讨论能谱对磁场的依赖关系以及相应边缘态的空间分布情况. 在长波极限下, 连续模型的哈密顿量可以用格点标记的紧束缚模型来描写, 两者在此种情况下是等价的. 下面我们就用紧束缚格点模型来研究二维 InAs/GaSb/AlSb 薄膜量子阱. 考虑最近邻跃迁的紧束缚模型, 其实空间格点模型的哈密顿量可以写作

$$H = H_0 + H_{BIA} + H_{SIA} \\ = \sum_{I,J} \left\{ [(M_0 - 4M_2)\tau_z \mathbf{1} + i\Delta_0 \tau_y \sigma_y] c_{I,J}^{\dagger} c_{I,J} \right. \\ + \left[-i\frac{A}{2} \tau_x \sigma_z + M_2 \tau_z \mathbf{1} - \frac{i\Delta_e}{4} (\tau_z + 1) \sigma_x \right. \\ \left. - \frac{i\Delta_h}{4} (1 - \tau_z) \sigma_x - \frac{\xi_e^*}{4} (1 - \tau_z) \sigma_y \right] c_{I+1,J}^{\dagger} c_{I,J} \\ + \left[i\frac{A}{2} \tau_y \mathbf{1} + M_2 \tau_z \mathbf{1} + \frac{i\Delta_e}{4} (\tau_z + 1) \sigma_y \right. \\ \left. - \frac{i\Delta_h}{4} (1 - \tau_z) \sigma_y + \frac{\xi_e}{4} (1 - \tau_z) \sigma_x \right] c_{I,J+1}^{\dagger} c_{I,J} \\ \left. + \text{h.c.} \right\}. \quad (11)$$

薛定谔方程满足 $H\psi(x, y) = E\psi(x, y)$, 其中 τ 表示轨道空间的泡利矩阵, 而 σ 表示自旋空间的指标, $\mathbf{1}$ 表示单位矩阵, I, J 分别是 x, y 方向单位矢量. 考虑 InAs/GaSb/AlSb 薄膜量子阱量子阱的一个 y 方

向取有限格点, 宽度为 L_y 的条形样品, x 方向做周期性边界条件连接 (窄条圆环状结构, 这一条件可以对应于傅里叶变换)

$$c_{x,y}^\dagger = \sum_{k_x} e^{ik_x x} c_{k_x,y}^\dagger. \quad (12)$$

则得到由 x 方向傅里叶变换得到的动量 $p_x = \hbar k_x$ 依然是好量子数, 对应的哈密顿量

$$\begin{aligned} \mathbb{H} = \sum_{k_x,y} \left\{ [(M_0 - 4M_2)\tau_z \mathbf{1} + i\Delta_0 \tau_y \sigma_y] c_{k_x,y}^\dagger c_{k_x,y} \right. \\ + \left[(A\tau_x \sigma_z + \frac{\Delta_e}{2}(\tau_z + 1)\sigma_x \right. \\ + \frac{\Delta_h}{2}(1 - \tau_z)\sigma_x) \sin k_x a + (2M_2 \tau_z \mathbf{1} \\ - \frac{\xi_e^*}{2}(1 - \tau_z)\sigma_y) \cos k_x a \left. \right] c_{k_x,y}^\dagger c_{k_x,y} \\ + \left[i\frac{A}{2}\tau_y \mathbf{1} + M_2 \tau_z \mathbf{1} + \frac{i\Delta_e}{4}(\tau_z + 1)\sigma_y \right. \\ - \frac{i\Delta_h}{4}(1 - \tau_z)\sigma_y \\ + \left. \frac{\xi_e}{4}(1 - \tau_z)\sigma_x \right] c_{k_x,y+1}^\dagger c_{k_x,y} + \text{h.c.} \left. \right\}. \quad (13) \end{aligned}$$

此时对应的波函数与实空间波函数有关系

$$\psi(x,y) = \sum_{k_x} \frac{e^{ik_x x}}{\sqrt{L_y}} \phi(k_x,y),$$

且

$$\mathbb{H}\psi(k_x,y) = E\psi(k_x,y),$$

方程 (13) 即为材料的理论模型哈密顿量, a 标记的格点间距, 其他参数与前文一致. 假定磁场在条形样品 $0 < y < L$ 不为零, 且外加磁场 \mathbf{B} 的效果将包括两部分: 交换场 (塞曼场 $g\tau_z\sigma_z$) 和矢势形式的轨道磁场 $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$, 则有交换场部分 $\mathbf{g} = g_0\mu_B\mathbf{B}$, $g_0 = \frac{1}{2}(G_h - G_e)$. $2G_e$ ($2G_h$) 分别是电子 (空穴) 的磁交换劈裂项 [19]. 将矢势取朗道规范带入动量 k , 可得

$$k_x \rightarrow k_x + \frac{eB}{\hbar c}y = \frac{eB}{\hbar c}\left(y + \frac{\hbar ck_x}{eB}\right), \quad (14)$$

进一步简化得到

$$k_x \rightarrow k_x + \frac{eB}{\hbar c}y = \frac{1}{l_B^2}(y + l_B^2 k_x) = \frac{1}{l_B^2}(y + y_0). \quad (15)$$

这个形式表明了哈密顿量的主要形式可以是一个以 $-y_0 = l_B^2 k_x$ 为中心的动量的函数, 这个中心与磁场大小成正比. 在以下数值计算中, 样品宽度取 $L_y = 500a$, 其中 $a = 0.5$ nm 为格点间距, 费米能 $E_f = -0.01$ eV, 材料各参数: $M_0 = -0.07$ eV,

$M_2 = -0.4$ eV·nm², $A = 0.03$ eV·nm, $\Delta_0 = 0.01$ eV, $\Delta_e = 0.01$ eV·nm, $\Delta_h = 0.001$ eV·nm, $\xi_e = 0.001$ eV·nm.

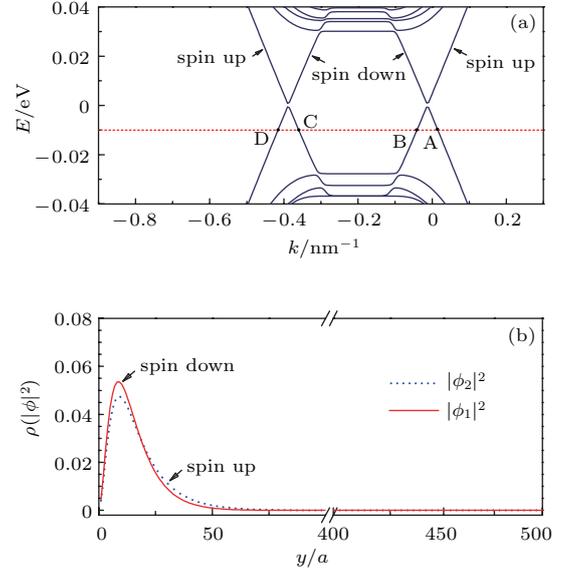


图1 (a) 能谱示意图; (b) 相应的电子态密度分布 $\rho(k_x,y) = |\phi(k_x,y)|^2$ (对应参数: 材料宽度 $L = 500a$, 磁场 $B = 1$ T, 其中实 (虚) 线分别表示费米面上不同动量 k_x 对应的电子态密度. 红色虚线标记费米面)

Fig. 1. (a) Calculated energy spectrum and (b) corresponding spatial state density distribution $\rho(k_x,y) = |\phi(k_x,y)|^2$ of selected states for $L = 500a$ and $B = 1$ T, where solid and dotted lines represent different k_x depends on the two states of the Fermi surface.

为了符合实际物理的参数范围, 磁长度

$$l_B = \sqrt{\frac{\hbar c}{eB}} \simeq \frac{25}{\sqrt{B(\text{T})}} (\text{nm})$$

远小于材料宽度 $L = 500a = 250$ nm. 如果我们将费米能选在带隙中, 那么对应一个给定的费米能, 会与能隙中交叉的边缘态有四个交点, 表明有四个不同的边缘态, 这里统一从左向右依次标记为 A, B, C, D. 通过对波函数的空间分布分析, 我们发现边缘态 A 和 B 局域在样品的一个边界, C 和 D 局域在另一个边界. 拿 A 和 B 这两个态作为例子进行研究, 从 A 和 B 点所在的色散曲线的斜率很容易看出两个边缘态是反向传播的 ($v_k = \partial E(k)/\partial k$). 也就是说在样品的一个边界上存在着两个反向传播的具有相反自旋极化的边缘态, 所以这两支边缘态不会导致净的电荷流, 但会贡献一个净自旋流, 费米面与边缘态的交点也直接对应材料边缘上的电子通道, 从而可以由这些电子的空间态密度分布看出边缘态随磁场变化的趋势. 正如前面所提到的, 对

于磁场 $B = 0$ 的情况, 系统满足时间反演对称性. 是标准的量子自旋霍尔态, 在此不再赘述. 本文的几幅图给出了 $B \neq 0$ 的几种情况下材料一个边界上两支电子的空间波函数 $\phi_a(k_x, y)$ 和 $\phi_b(k_x, y)$ 的模平方, 即空间态密度分布随空间位置 y 的变化: 随着磁场 B 的增长, $\rho_a(k_x, y) = |\phi_a(k_x, y)|^2$ 依然处于边缘 $y = 500a$, 相反, $\rho_b(k_x, y) = |\phi_b(k_x, y)|^2$ 的形状变矮变宽, 说明了它在空间上朝中心运动的趋势.

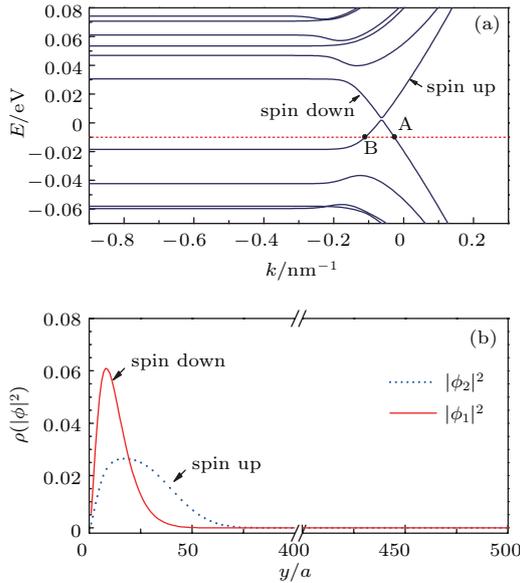


图2 (a) 能谱示意图 (黑点为边缘态与费米能的交点); (b) 相应的电子态密度分布 $\rho(k_x, y) = |\phi(k_x, y)|^2$ (对应参数: 材料宽度 $L = 500a$, 磁场 $B = 5$ T, 其中实(虚)线分别表示费米面上不同动量 k_x 对应的电子态密度. 红色虚线标记了费米面的位置)

Fig. 2. (a) Calculated energy spectrum and (b) corresponding spatial state density distribution $\rho(k_x, y) = |\phi(k_x, y)|^2$ of selected states for $L = 500a$ and $B = 5$ T, where solid and dotted lines represent different k_x depends on the two states of the Fermi surface. Red point represents the intersection of band and Fermi surface.

如图 1(a) 所示, 在非零磁场 $B = 1$ T 的情况下, 系统的能谱形成了水平的朗道能级, 从 (15) 式也可知, 以 $-y_0 = l_B^2 k_x$ 为动量中心的能谱发生了整体朝 $-k$ 方向的移动, 朗道能级间距 ($\propto l_B$) 也随之增大导致原来体带中轨道部分简并的能态发生劈裂, 但因为此时磁场较小, 轨道部分的劈裂并不是非常明显, 两个交叉的边缘态在能谱图上的距离并不明显. 从图 1(b) 可以看出: 材料 $y = 0$ 边界上两条自旋极化的边缘态空间部分的重合依然很大.

为了更加简单清楚, 各图 (a) 部分都只画出部分能谱, 对应于条形圆环状材料的一条边界. 对比图 1(a), 图 2(b) 可以看出, 增大的磁场 ($B = 5$ T) 导致了更加明显的朗道能级, 动量中心位置有了很大移动, 朗道能级的间距也随之变大, 同时交换场 $g \propto |B|$ 的作用, 导致两种不同自旋能级差变大: 一种自旋的电子能态升高, 而另一种降低, 从而在能费米面 E_f 上两支自旋极化相反的电子会表现为: 其中一支自旋极化边缘态与费米面的交点向动量中心移动, 更加靠近能带的中心, 另一支的交点几乎不发生移动. 而从电子空间态密度分布可以看出, 此时其中一支边缘态依然留在边界位置, 而另一支自旋极化相反的边缘态已经朝中心移动.

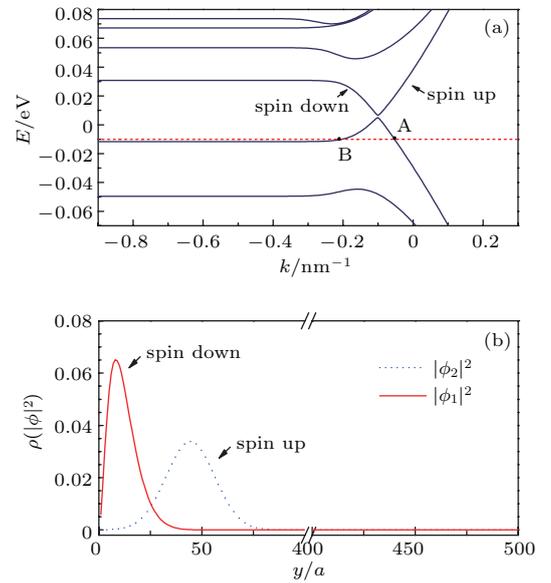


图3 (a) 能谱示意图 (黑点为边缘态与费米能的交点); (b) 相应的电子态密度分布 $\rho(k_x, y) = |\phi(k_x, y)|^2$ (对应参数: 材料宽度 $L = 500a$, 磁场 $B = 8.8$ T, 其中实(虚)线分别表示费米面上不同动量 k_x 对应的电子态密度)

Fig. 3. (a) Calculated energy spectrum and (b) corresponding spatial state density distribution $\rho(k_x, y) = |\phi(k_x, y)|^2$ of selected states for $L = 500a$ and $B = 8.8$ T, where solid and dotted lines represent different k_x depends on the two states of the Fermi surface. Red point represents the intersection of band and Fermi surface.

对比图 2(a), 图 3(b) 所示: 随着磁场的增加, 朗道能级间距继续增大, 边缘态与费米面的交点也说明了其中一支缓慢进入体能隙的趋势. 通常情况下, 对有限大小的拓扑绝缘体外加磁场, 并增大到某一临界值 B_c , 系统才会发生相变, 并且这个相变会导致能隙的关闭再打开, 同时伴随着边缘态的消失. 而本文中的磁场处于 $0 < B < B_c$ 的范围, 这由体能隙未发生闭合可以看出. 在这个磁场

范围内,量子自旋霍尔效应的演变是随磁场增加缓慢进行的:不同自旋极化的边缘态随外场分离,其中之一局域在原来的边界,另一支则渐渐进入材料的内部,在这一过程中没有发生相变,材料块体内部依然是拓扑非平庸的,边缘态的变化则反映了材料边缘性质受外加场的影响.当给定费米能量 $E_f = -0.01$ eV,对于上述三个不同磁场,费米面上的边缘态在样品表面上的典型空间概率分布如图(b)所示.对于磁场 $B = 1$ T,自旋向上和自旋向下极化的两个边缘态都局域在 $y = 0$ 附近,在空间上有显著的重叠,对比较大磁场 $B = 5$ T跟 $B = 8.8$ T,尽管自旋向下的边缘态依然在 $y = 0$ 附近,可以明显看到自旋向上的边缘态已经从 $y = 0$ 向材料中心移动.

在实际材料的应用当中,磁场以及杂质的影响几乎是不可避免的,所以量子自旋霍尔效应在磁场跟杂质影响下的稳定性至关重要,我们的计算结果和前面定性讨论所建立的物理图像非常一致^[20-22],说明了即使在较大范围磁场的作用下(时间反演对称破坏的情况下)量子自旋霍尔效应的稳定性依然很好,这也为其在实际实验材料的可行性提供了理论支持.

接下来我们将讨论系统在杂质散射(考虑非磁性掺杂,如硅(Si)的情形)作用下的情况.假设Si原子的位置是随机分布的, \mathbf{r} 是电子坐标算符, \mathbf{r}_α 是第 α 个Si原子的位置, n_{Si} 表示原子面密度,则 $N = L_y \times I_x \times n_{Si}$ 是单位长度窄条状材料面积内的杂质密度,即 x 方向单位长度 $\times L_y$ 面积内的Si原子个数,最后,设杂质散射势的大小为 V_0 ,于是得到掺杂对系统的作用哈密顿量 H' 表达式为

$$H' = -\frac{1}{\pi} \sum_{\alpha=0}^{N=L_y \times n_{Si}} V_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha). \quad (16)$$

边缘通道中出现的散射,我们定义为不同边缘态之间的弹性散射,而发生该散射的概率可以定义为散射动量弛豫时间的倒数,由费米黄金规则的跃迁概率求出,于是有边缘上两支电子之间的散射可以写为

$$T_{r \rightarrow r'} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi(x', y') | H' | \psi(x, y) \rangle|^2 \rho(E_f), \quad (17)$$

其中 $\psi(x, y) = \sum_{k_x} \frac{e^{ik_x x}}{\sqrt{L_y}} \phi(k_x, y)$ 代表了实空间波函数, $\rho(E_f) = \delta(E - E_f)$ 为电子的费米分布,在零温近似下,可以假设费米面之下的电子不参与散

射,而只考虑费米面处电子间的散射,此时,固定费米面 $E = E_f$ 上两支边缘态的散射强度:

$$\begin{aligned} T_{r \rightarrow r'} &= \frac{2V_0^2}{\pi\hbar} \left| \sum_{\alpha=0}^N \sum_{k_x, k'_x} \frac{1}{L_y} e^{ik'_x x' - ik_x x} \delta(x - x_\alpha) \right. \\ &\quad \left. \times \delta(y - y_\alpha) \langle \phi(k'_x, y) | \phi(k_x, y') \rangle \right|^2 \\ &= \frac{2V_0^2}{\pi\hbar} \left| \sum_{\alpha=0}^N \frac{1}{L_y} \langle \phi(k'_x, y) | \phi(k_x, y) \rangle \right|^2 \\ &= \frac{2V_0^2}{\pi\hbar} |n_s \langle \phi(k'_x, y) | \phi(k_x, y) \rangle|^2 \\ &= \frac{2V_0^2 n_s^2}{\pi\hbar} |\langle \phi(k'_x, y) | \phi(k_x, y) \rangle|^2. \end{aligned} \quad (18)$$

根据以上公式,我们在图4画出了不同费米面大小情况下的散射强度,为了使结果清晰明了,图中取散射强度的单位为 $\frac{2V_0^2 n_s^2}{\pi\hbar}$,在费米能取值一定的情况下,散射强度的大小由杂质散射势 V_0 与杂质掺杂面密度 n_s 决定.

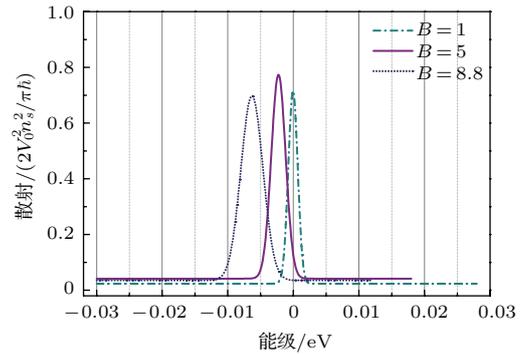


图4 不同边缘态之间的散射概率

$$T_{r \rightarrow r'} = \frac{2V_0^2 n_s^2}{\pi\hbar} |\langle \phi(k'_x, y) | \phi(k_x, y) \rangle|^2,$$

V_0 为杂质散射强度 (n_s 为单位长度窄条装材料面积内的杂质密度,磁场的变化用不同虚线表示)

Fig. 4. The scattering of the two edge states is defined as the transition probability from the state

$$T_{r \rightarrow r'} = \frac{2V_0^2 n_s^2}{\pi\hbar} |\langle \phi(k'_x, y) | \phi(k_x, y) \rangle|^2,$$

V_0 . Scattering intensity of the impurity represented as V_0 , n_s is the area density of impurities per unit length of material, different lines corresponding to the different magnetic field situations.

如图4所示,这里的散射概率代表了在边缘区域,两支边缘态受杂质散射的散射程度,我们考虑了随机分布的点状杂质,并假设只有费米面上的电子参与这个散射过程,所以在改变费米能(即横轴的数值),并保证费米面处于能隙之间的情况下,会看到不同磁场下的散射有以下区别: 1) 费米能的

取值范围, 磁场的大小会导致朗道能级间距的变化, 也使得体能带间的能隙大小随磁场发生变化, 而为了清楚的看到边缘态的性质, 我们将费米面取在体能隙之间, 不去讨论体电子的性质, 所以体能隙的宽度对应了费米面的取值范围. 因此可以看到, 图中三个不同磁场对应散射曲线其横轴的宽度是不同的. 2) 散射的位置, 交换场与外加磁场大小成正比, 效果是会导致不同自旋的电子能带升高或降低, 这个过程也表现为能谱上两只边缘态交点的位置也变化, 由于两支边缘态之间的散射会受电子耦合作用的影响, 因而两支边缘态交点的位置对应的散射强度最大, 从图中可以看到, 磁场的变化改变了散射峰值的位置, 这正是因为交换场的作用改变了边缘态交点的位置, 所以会使得在不同大小磁场的作用下, 散射强度的峰值随费米面位置变化发生偏移. 同时, 对比三种不同磁场大小的散射曲线可以看出, 散射强度的峰值并没有明显的变化, 说明了磁场在一定范围内的变化, 并不会明显增加或减小散射强度, 因此对材料的杂质散射没有太大影响.

3 结 论

量子自旋霍尔边缘态在时间反演对称性或有其他对称性的系统中存在, 在时间反演对称性系统, 拓扑数保证了存在量子自旋霍尔的边缘态, 就像整数霍尔效应用陈数来表征. 一旦破坏了系统的时间反演对称性, 物理现象就会变得丰富起来. 我们讨论了窄条圆环状结构的 InAs/GaSb/AlSb 材料在外加垂直磁场作用下其边缘态的性质. 外加磁场破坏了时间反演对称的要求, 通过磁场的变化引起朗道能级的移动, 导致费米面上的边缘态电子空间分布发生变化. 两个运动方向及自旋极化相反的边缘态在空间上被分成了两个通道, 表现为相向运动的两个量子自旋霍尔态的一支边缘态推向材料内部, 而另一个边缘态仍然留在外边界, 并且它们的自旋极化方向和运动方向均没有改变, 所以在磁场比较小的情况下, 依然存在一个时间反演对称性破缺的量子霍尔效应, 体能隙没有闭合也表明了体能带的拓扑性并没有受到太大的影响, 外加磁场

对边缘态的扰动则是导致同边界两支边缘态发生空间分离的原因. 我们还考虑了非磁性杂质的散射作用对这一性质的影响, 发现增大磁场的过程没有使散射强度(弛豫时间的倒数)有明显变化, 说明了边缘态受磁场作用而推移的过程并不会受到杂质散射的影响. 综合以上, 证明了即使存在破坏时间反演对称性的微扰, 量子自旋霍尔效应也具有一定的稳定性.

参考文献

- [1] Klitzing K V, Dorda G, Pepper M 1980 *Phys. Rev. Lett.* **45** 494
- [2] Thouless D J, Kohmoto M, Nightingale M P, den Nijs M 1982 *Phys. Rev. Lett.* **49** 405
- [3] Haldane F D M 1988 *Phys. Rev. Lett.* **45** 61
- [4] C L Kane, E J Mele 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 226801
- [5] Bernevig B A, Mele E J 2005 *Phys. Rev. Lett.* **96** 106802
- [6] Bernevig B A, Hughes T L, Zhang S C 2006 *Science* **314** 1757
- [7] König M, Wiedmann S, Brüne C, Roth A, Buhmann H, Molenkamp L W, Qi X L, Zhang S C 2007 *Science* **318** 766
- [8] Wu C, Bernevig B A, Zhang S C 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 106401
- [9] Kane C L, Mele E J 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 226801
- [10] Kane C L, Mele E J 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 146802
- [11] Bernevig B A, Hughes T L, Zhang S C 2006 *Science* **314** 1757
- [12] Sheng L, Sheng D N, Ting C S, Haldane F D M 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 136602
- [13] Sheng D N, Weng Z Y, Sheng L, Haldane F D M 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 036808
- [14] Prodan E 2009 *Phys. Rev. B* **80** 125327
- [15] Li H C, Sheng L, Sheng D N, Xing D Y 2010 *Phys. Rev. B* **82** 165104
- [16] Prodan E 2010 *New J. Phys.* **12** 065003
- [17] Du L J, Knez I, Sullivan G, Du R R 2013 *arXiv:1306.1925*. <http://arxiv.org/abs/1306.1925>
- [18] Liu C X, Hughes T L, Qi X L, Wang K, Zhang S C 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 236601
- [19] Liu C X, Qi X L, Dai X, Fang Z, Zhang S C 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 146802
- [20] Yang Y, Xu Z, Sheng L, Wang B G, Xing D Y 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 066602
- [21] Li H C, Sheng L, Xing D Y 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 196806
- [22] Li H C, Sheng L, Shen R, Wang B G, Sheng D N, Xing D Y 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 266802

SPECIAL ISSUE— Celebrating 100 anniversary of physical science in Nanjing University

Edge mode of InAs/GaSb quantum spin hall insulator in magnetic field*

Wang Qing¹⁾ Sheng Li^{1)2)†}

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

2) (Center of Artificial Microstructure Science and Technology Innovation, Nanjing 210093, China)

(Received 30 December 2014; revised manuscript received 22 February 2015)

Abstract

The properties of the edge states in the topological insulator InAs/GaSb/AlSb quantum well in the presence of a perpendicular magnetic field are studied numerically. The effect of the magnetic field is included in our model by adding an on-site Zeeman term and a vector potential to the electron wave vector: $\mathbf{k} + e\mathbf{A}$. When the material is in the topologically nontrivial state, a pair of degenerate counter-propagating spin-polarized edge states exist in the bulk band gap on each edge of the sample, which are gapless in the absence of the magnetic field due to the protection of the time reversal symmetry.

Nonzero magnetic field breaks the time reversal symmetry, and leads to Landau levels in the electron energy spectrum. However, one can still find a pair of counter-propagating spin-polarized edge states in the bulk energy gap near each sample boundary. The edge states are gapped, and their distributions relative the sample edge depend on the strength of the magnetic field. With the increase of the magnetic field, one edge state remains located near the sample boundary, but the other tends to evolve into the bulk gradually. Furthermore, we study the scattering between the two edge states caused by impurities. We show that the scattering rate is suppressed because of the spatial separation of two edge states, and shows no significant enhancement when the magnetic field increases, which suggests that even though the time reversal symmetry is broken, the quantum spin Hall state remains to be relatively robust.

Keywords: topological insulator, quantum spin hall effect, Landau levels, edge state

PACS: 73.20.At, 73.43.-f, 73.63.Hs

DOI: 10.7498/aps.64.097302

* Project supported by the State Key Program for Basic Researches of China (Grants Nos. 2015CB921202, 2014CB921103), and the National Natural Science Foundation of China (Grants No. 11225420).

† Corresponding author. E-mail: shengli@nju.edu.cn