

# 拓扑绝缘体 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 中层堆垛效应的 第一性原理研究\*

陈艳丽<sup>1)</sup> 彭向阳<sup>1)†</sup> 杨红<sup>1)2)‡</sup> 常胜利<sup>3)</sup> 张凯旺<sup>1)</sup> 钟建新<sup>1)</sup>

1)(湘潭大学材料与光电物理学院, 微纳能源材料与器件湖南省重点实验室, 湘潭 411105)

2)(吉首大学物理与机电学院, 吉首 416000)

3)(国防科技大学理学院, 长沙 410073)

(2014年4月12日收到; 2014年5月20日收到修改稿)

运用第一性原理方法, 研究了拓扑绝缘体  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  块体和薄膜中的层堆垛对其结构、电子态、拓扑态和自旋劈裂的影响. 发现不同的堆垛会引起  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  层间的相互作用, 改变系统的中心对称性. 块体的 ABC 和 AAA 堆垛都具有中心对称性和相似的能带结构. ABA 堆垛破坏了体系的中心对称性, 能带发生很大改变, 并且产生了很大的能带自旋劈裂. 用能带反转的方法判定体系的拓扑相, 在不同堆垛的  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  块体中, 考虑自旋轨道耦合时都发生了能带反转, 因而具有不同堆垛的  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  仍是拓扑绝缘体. 进一步研究了  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  薄膜中的堆垛效应, 发现非中心对称的 ABA 堆垛在  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  薄膜中引起明显的自旋劈裂, 并且提出和验证了用应变调控自旋劈裂的方法.

**关键词:** 拓扑绝缘体, 拓扑相, 自旋轨道耦合, 自旋劈裂

**PACS:** 73.20.-r, 73.21.-b, 68.55.-a, 71.15.Mb

**DOI:** 10.7498/aps.63.187303

## 1 引言

拓扑绝缘体是继石墨烯之后凝聚态物理中的重大发现<sup>[1-5]</sup>. 由于强的自旋轨道耦合, 它们的金属表面态具有受拓扑保护的 Dirac 锥<sup>[4,5]</sup>.  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  是第二代三维强拓扑绝缘体, 是目前的研究焦点<sup>[4-6]</sup>. 它的体内具有非常强的自旋轨道耦合作用, 在块体能带中形成反转带隙, 而在表面或界面上则形成受时间反演对称性保护的金属态<sup>[6]</sup>. 在拓扑表面态中的电子具有 Dirac 准粒子行为, 其自旋和动量方向是锁定的<sup>[7]</sup>. 这些性质不仅具有重大和深刻的科学意义, 而且在自旋电子学和量子计算等方面具有巨大和独特的应用价值<sup>[4,5,8-15]</sup>.  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$

是由一个一个五原子层 (quintuple layer, QL) 堆垛而成, 每个 QL 层内部是由 Se-Bi-Se-Bi-Se 五层原子层通过强的共价键组成, QL 之间是弱的范德瓦尔斯 (van der Waals, vdW) 力相互作用. 在  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  中, QL 一般按 ABC 的顺序堆垛. 由于 QL 之间只有弱的 vdW 作用, 堆垛顺序有可能改变, 形成 AAA 和 ABA 等不同的堆垛. 多层石墨烯之间也是 vdW 作用, 实验发现, 具有不同堆垛 (AAA, ABC, ABA) 的三层石墨烯具有显著不同的能带结构, 显示出不同的电子输运性质, 这对石墨烯的应用带来更丰富的内容<sup>[16]</sup>.  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  同样具有 vdW 层状结构, 因此有必要研究堆垛对其性质 (结构、电子态和拓扑相) 的影响.  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  具有很强的自旋轨道耦合, 但在常见的 ABC 堆垛的结构中, 没有自旋劈裂, 这是由于

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11274265, 11464013, 11074211, 11274262)、国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2012CB921303)、湖南省政府芙蓉学者计划和湖南省教育厅科学研究重点项目 (批准号: 10A118)、吉首大学引进人才项目 (批准号: jsdxrcyjkyxm201309) 和湖南省教育厅一般项目 (批准号: 14C0939) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: [xiangyang\\_peng@xtu.edu.cn](mailto:xiangyang_peng@xtu.edu.cn)

‡ 通讯作者. E-mail: [yanghong@jsu.edu.cn](mailto:yanghong@jsu.edu.cn)

ABC堆垛的 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 具有中心对称性的缘故. 在另一种类似的层状材料 $\text{BiTeI}$ 中没有中心对称, 其强自旋轨道耦合产生了比普通半导体中大一到两个数量级的巨Rashba自旋劈裂<sup>[17]</sup>. 某些堆垛可以改变 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 的中心对称性, 因此可以期待用改变堆垛的方法在 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 中产生巨Rashba自旋劈裂. 实验和理论发现, 在ABC堆垛的 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 薄膜的表面具有Dirac锥<sup>[6,7,11]</sup>, 如果QL堆垛之间发生改变, Dirac锥会如何变化、能带会不会发生劈裂问题都值得深入研究.

本文用第一性原理方法, 比较了在不同堆垛情况下体系的能量, 计算了在不同堆垛情况下 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 块体的能带, 用能带反转的方法判明了 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 在不同堆垛情况下的拓扑相, 研究了具有非中心对称堆垛 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 中的自旋劈裂, 并探讨了应变对自旋劈裂的影响. 研究了具有不同堆垛的 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 的薄膜, 分析了Dirac锥和能带自旋劈裂与堆垛的关系, 并提出用应变对其自旋劈裂调控.

## 2 计算方法

在计算中采用基于密度泛函的VASP (vienna ab-initio simulation package, VASP) 程序<sup>[18,19]</sup>, 用Perdew-Burke-Ernzerhof广义梯度近似<sup>[20]</sup>. 波函数用平面波展开, 截断能设为340 eV. 电子和离子间的相互作用用缀加投影波势描述<sup>[21]</sup>. 在计算中考虑了电子的自旋轨道耦合. 六角形 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 块体的原胞中有3个QL, 15个原子. 在本文中, 薄膜的厚度为3 QL并采用超胞 (supercell) 描述, 在相邻超胞中 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 薄膜的间距为15 Å. 本文研究的ABC, AAA和ABA三种堆垛的 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 的结构如图1所示. 布里渊区用以 $\Gamma$ 点为中心的 $11 \times 11 \times 1$ 的网络采样. 在结构弛豫中, 对每个原子位置都进行了优化, 使其受力小于0.01 eV/Å.

## 3 结果与分析

### 3.1 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 块体中的堆垛效应

首先考虑具有ABC堆垛的块体. ABC堆垛是 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 的常见堆垛形式, 具有空间反演对称性. 用VASP程序对晶格和原子进行弛豫, 得到的晶格常数为 $a = 4.153 \text{ \AA}$ ,  $c = 28.3 \text{ \AA}$ , 与实验符合得很好<sup>[6,11]</sup>. 根据拓扑绝缘体的理论, 拓扑绝缘体中的强自旋轨道耦合会使在时间反演不变的 $k$ 点处的

最高占据和最低未占据态发生反转, 体现在电荷分布上, 就是有和没有考虑自旋轨道耦合时最高占据态和最低未占据态的电荷分布是相反的. 对于 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ , 发生能带反转的位置只能在 $\Gamma$ 点. 我们计算了 $(\text{Bi}_2\text{Se}_3)_{\text{ABC}}$ 的能带, 如图2(a)所示. 如果在计算中不考虑自旋轨道耦合的作用,  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 块体的能带是直接带隙, 大小约为0.192 eV. 如果在计算中考虑自旋轨道耦合, 能带则发生了显著的变化, 此时体的能带变成了间接带隙, 带隙约为0.313 eV, 如图2(a)左所示, 与理论计算和实验测量值相符<sup>[11,22]</sup>. 我们计算了 $\Gamma$ 点最高占据态和最低未占据态的电荷分布, 如图2(a)右所示. 在没有考虑自旋轨道耦合时, 在 $\Gamma$ 点最高占据态的电荷密度集中分布在Se原子上, 而最低未占据态的电荷密度主要分布在Bi原子上. 包含了自旋轨道耦合后,  $\Gamma$ 点最高占据态的电荷密度主要分布在Bi原子上, 而最低未占据态的电荷密度主要分布在Se原子上. 由此可知, 由于自旋轨道耦合的作用, 能带结构在 $\Gamma$ 点处发生了反转, 因此 $(\text{Bi}_2\text{Se}_3)_{\text{ABC}}$ 晶体是拓扑绝缘体<sup>[6]</sup>.

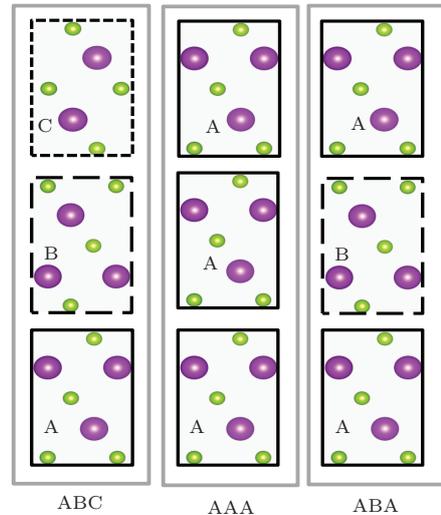


图1  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  的ABC, AAA和ABA堆垛 图中紫色和绿色小球分别代表Bi原子和Se原子; A, B和C型的五原子层分别用实线、虚线和点划线的方框标示

由于 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 中的QL层间是vdW相互作用, 像在石墨烯中那样, 层之间的堆垛顺序可以发生改变. 我们感兴趣的是当堆垛发生改变后, 体系的能带和拓扑相会发生怎样的变化. 当 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 晶体按AAA的方式堆垛时, 它仍然具有空间反演对称性. 图2(b)左所示为 $(\text{Bi}_2\text{Se}_3)_{\text{AAA}}$ 晶体的能带, 可以看出, 它与 $(\text{Bi}_2\text{Se}_3)_{\text{ABC}}$ 的能带相似, 同样具有间接带隙. 考虑自旋轨道耦合时, 在 $\Gamma$ 点处带隙约

为0.405 eV, 比ABC堆垛的带隙大. 为了判别其拓扑性质, 我们计算了 $\Gamma$ 点最高占据态和最低未占据态的电荷分布. 从图2(b)右中可以看出,  $\Gamma$ 点处的最高占据态的电荷本来集中分布在Se原子上, 加自旋轨道后变为集中在Bi原子上, 而 $\Gamma$ 点处的最低未占据态的电荷由集中分布在Bi原子上变为集中在Se原子上. 因此, 加自旋轨道耦合前后发生了能带反转,  $(\text{Bi}_2\text{Se}_3)_{\text{AAA}}$  仍是拓扑绝缘体.

由于ABA的堆垛方式会破坏中心反演对称性, 因此 $(\text{Bi}_2\text{Se}_3)_{\text{ABA}}$  的能带发生了很大的变化. 最明显的一个特征是在 $\Gamma$ 点附近的最高占据态的能带与ABC和AAA比较明显向下弯曲, 形成“M”状, 导带底更靠近费米能级, 体系的间接带隙明显减小. 加和未加自旋轨道耦合时的带隙分别变为0.05 eV

和0 eV, 如图2(c)左所示. 这说明体系的能带与对称性是紧密联系的. 我们对在 $\Gamma$ 点处最高占据态和最低未占据态的电荷分布进行了计算, 得出它们分别是由Bi和Se原子的 $P_z$ 态决定的. 由于QL层间的vdW相互作用主要与Bi和Se原子的 $P_z$ 态有关, 堆垛主要影响的是QL层间的vdW作用. ABA堆垛打破体系的中心对称性后, QL层间的相互作用发生大的变化, 进而引起带隙两侧的能带的变化. ABC和AAA堆垛结构在 $\Gamma$ 点处最高占据态和最低未占据态的电荷在原胞中的三个QL层中是均匀分布的, 而在ABA堆垛的情况下, 由于不具有中心对称, 在 $\Gamma$ 点处最低未占据的电荷主要分布在原胞中, 且不均匀, 主要分布在其中的两QL层中. 在未

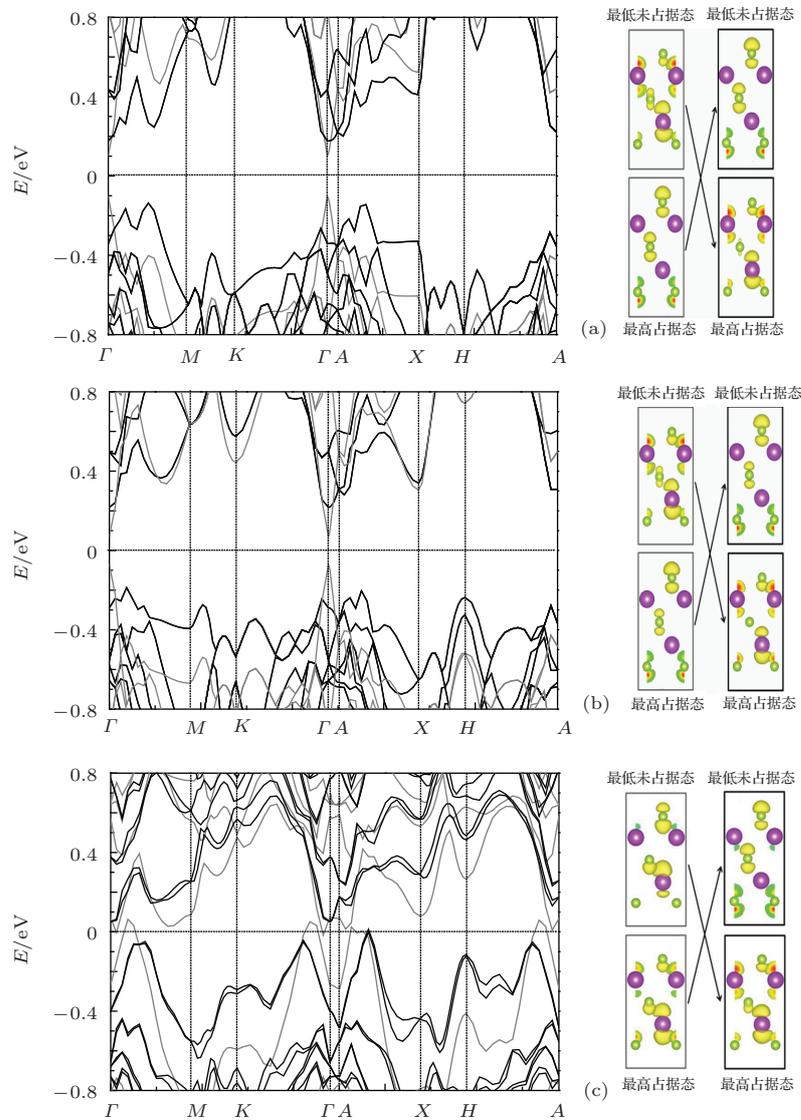


图2 能带和电荷分布 (a), (b)和(c)的左右分别是 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 在ABC, AAA和ABA堆垛情况下的能带和在 $\Gamma$ 点处的最高占据态和最低未占据态的电荷分布; 左图中的黑色和灰色线条分别表示加和未加自旋轨道耦合时体系的能带; 右图中的黑色和灰色线框分别表示在加和未加自旋轨道耦合时的电荷分布

加自旋轨道耦合的时候, 在  $\Gamma$  点处最高占据态和最低未占据态的电荷分布分别集中在 Se 和 Bi 原子上, 与加自旋轨道耦合的分布正好相反(图 2(c) 右), 说明发生了能带反转,  $(\text{Bi}_2\text{Se}_3)_{\text{ABA}}$  仍然是拓扑绝缘体.  $(\text{Bi}_2\text{Se}_3)_{\text{ABA}}$  的另一个显著特征是出现了明显的自旋劈裂. 在  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  中有很强的自旋轨道耦合作用, 但是在 ABC 和 AAA 堆垛中体系具有中心对称性, 不能产生自旋劈裂. 而在 ABA 堆垛中, 破坏了  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  中心对称性, 结合强的自旋轨道耦合作用, 产生了很大的自旋劈裂, 而且劈裂的数值比普通的半导体异质结中的自旋劈裂要大一个数量级以上. 从图 2(c) 左中可以看出, 在有些  $k$  点处, 自旋劈裂大于 100 meV. 大的自旋劈裂在自旋电子器件中有很重要的应用, 例如在自旋场效应 Das-Datt 晶体管中. 具有大的自旋劈裂的材料有利于电场控制器件中的自旋方向, 大幅减小器件体积和提高工作温度 [23–25]. 因此, 不具有中心对称堆垛的  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  在自旋电子学中将有重要应用.

### 3.2 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 薄膜中的堆垛效应

拓扑绝缘体薄膜在基于拓扑绝缘体的纳米器件中有重要应用. 我们研究了具有 ABC, AAA 和 ABA 三种不同堆垛的厚度为 3 QL 的  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  薄膜. 图 3(a) 为  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  薄膜的能带, 它是按 3 QL 的 ABC 堆垛的. 在它的表面态附近, 存在能量与波矢的

线性关系, 并且可以看出能带形状类似于 Dirac 锥形, 可以看出有两个量子阱态出现在费米能级和表面态上面. 在没有结构优化时, Dirac 点处会有一个很小的带隙, 约为 0.0085 eV, 与文献 [22] 计算的值相符. 考虑 QL 间的 vdW 作用, 优化结构后带隙增大到 0.13 eV, 与理论计算 [22] 和实验符合得很好 [6]. 图 3(b) 所示为按 AAA 堆垛的 3 QL- $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  薄膜的能带, 它和 ABC 堆垛的 3 QL 膜的能带相似, 也在费米能级处形成了 Dirac 锥, 未优化是能带在 Dirac 点处会有一个小的带隙 (0.0642 eV). 优化后, 带隙变为 0.25 eV.

当 3 QL- $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  薄膜按 ABA 方式堆垛时, 其能带发生了明显的自旋劈裂, 如图 2(c) 所示. 这是由于  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  具有很强的自旋轨道耦合, 而 ABA 堆垛破坏了空间反演对称性, 这样使每个能带都产生了很大的自旋劈裂, 在靠近  $\Gamma$  点附近处的一些能带劈裂大 100 meV. 我们计算了量子阱态 Q1 在  $E = 0.26$  eV 能量面处的自旋极化矢量分布, 这里主要把自旋极化矢量在  $x, y$  平面的投影分布考虑在内. 如图 4 所示, 它是由两个反相的螺旋同心圆构成; 在里面的圆中, 自旋极化矢量呈现左手螺旋定则, 而在外圆, 自旋极化矢量呈右手螺旋定则, 成为 Rashba 自旋劈裂的一个很明显的重要特点 [26]. 但是当考虑 vdW 弛豫进行原子结构优化后, 能带的

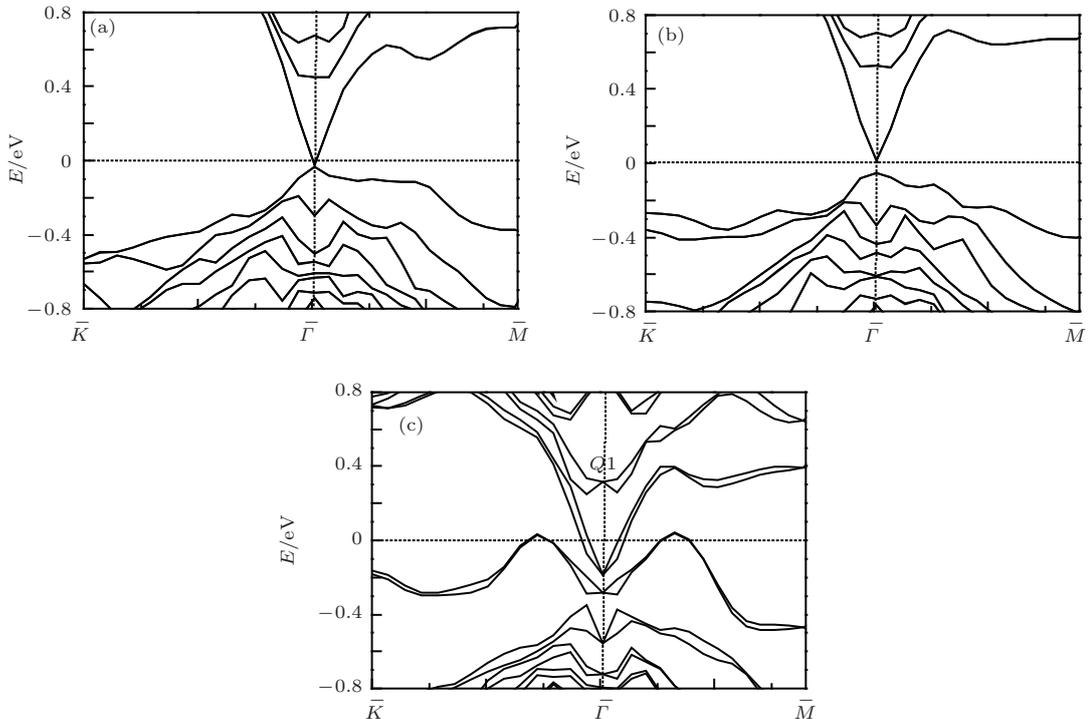


图 3 厚度为 3 QL 的  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  薄膜在不同堆垛情况下的能带 (a) ABC 堆垛; (b) AAA 堆垛; (c) ABA 堆垛; 费米能级设为 0 eV

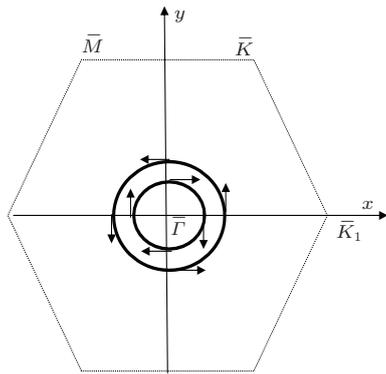


图4 同心圆是图3(c)中量子阱态Q1在  $E = 0.26$  eV 的等能量线, 沿圆的箭头表示在等能量线处的自旋极化矢量分布, 六角形为  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  薄膜的布里渊区示意图

自旋劈裂显著减小, 这是由于原子弛豫后QL之间的间距从块体中的  $2.25 \text{ \AA}$  变为  $2.45 \text{ \AA}$ , 量子阱态Q1的最大劈裂能量减小为  $20 \text{ meV}$ , 如图5(a)所示. 理论计算表明<sup>[27]</sup>, 自旋轨道耦合强度随QL之

间的间距成反比, 因此我们可以通过沿  $c$  轴加压应变的方法, 减小QL的间距, 增强体系的自旋轨道耦合和QL之间的势梯度, 从而增大能带的自旋劈裂. 体系沿  $c$  轴压缩5%后再经过原子弛豫, QL的间距减少至  $2.138 \text{ \AA}$ , 能带发生了很大的自旋劈裂, Q1的最大劈裂能量为  $108 \text{ meV}$ . 沿  $c$  轴压缩10%后, 弛豫后的QL间距和Q1的最大自旋劈裂能量分别为  $1.91 \text{ \AA}$  和  $151 \text{ meV}$ . 可见, 在压应变下  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  薄膜的自旋劈裂相较于普通半导体, 可以大一个数量级以上<sup>[17]</sup>, 而且可以在  $20\text{--}150 \text{ meV}$  这样宽的范围内调节, 这对应用而言是非常理想的. 在基于拓扑绝缘体的自旋电子器件中, 拓扑绝缘体主要以薄膜的形式出现. 通过堆垛在拓扑绝缘体中实现大的自旋劈裂, 以应变来调控自旋劈裂, 这将丰富拓扑绝缘体在新型器件中的应用.

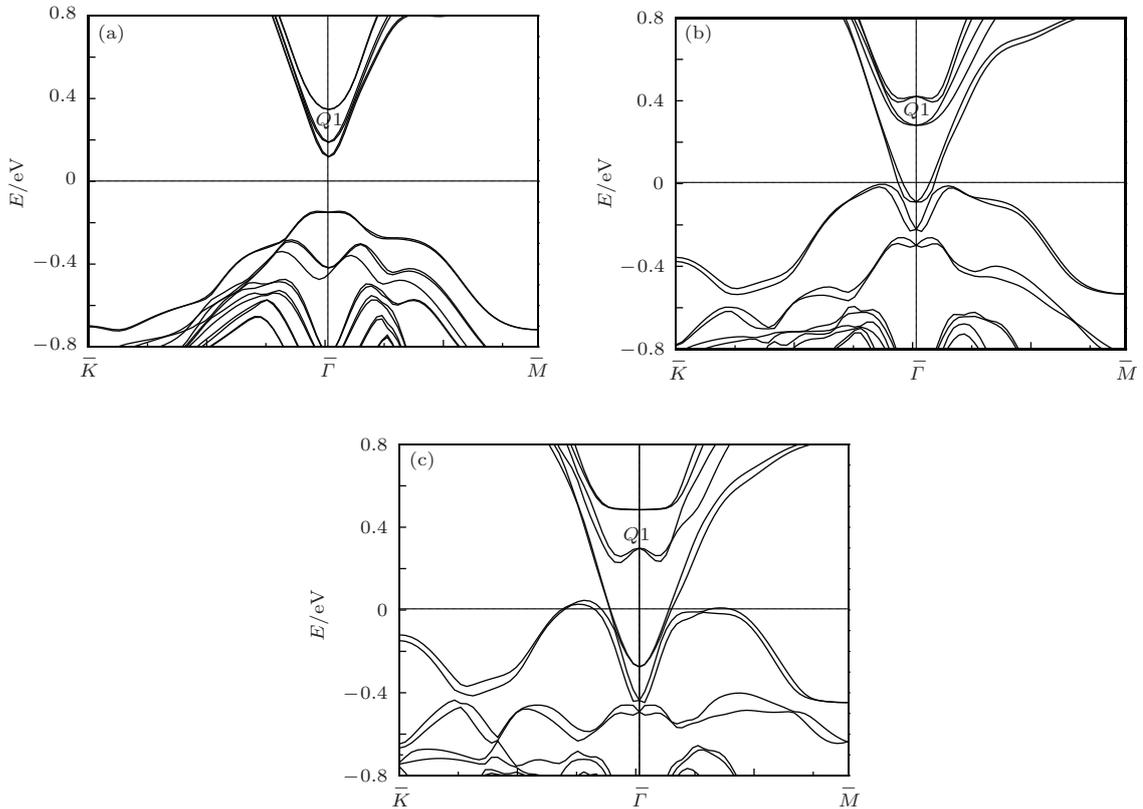


图5 (a)—(c) 分别为沿  $c$  轴方向压缩0%, 5%, 10% 的ABA堆垛的3QL  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  能带图, 对应的量子阱态Q1的最大Rashba自旋劈裂能量分别为  $20, 108$  和  $151 \text{ meV}$

## 4 结 论

本文用第一性原理计算的方法研究了拓扑绝缘体  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  块体和薄膜中的堆垛效应. 研究发现

堆垛可以改变  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  的QL之间的间距, 从而影响QL之间的vdW作用. 改变堆垛顺序还可以使体系的对称性发生改变. 保持体系中心对称性的堆垛, 对  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  的能带改变不明显. 当堆垛破坏体系的中心对称性时,  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  的能带发生显著变化: 能带

的色散和带隙等都发生明显改变; 能带发生很大的自旋劈裂, 自旋劈裂的大小比普通半导体异质结构的要大一到两个数量级. 这是由堆垛的非中心对称性和 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 的强自旋轨道耦合引起的. 通过用能带反转的判断方法研究了堆垛对体系拓扑相的影响, 发现堆垛改变后 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 仍是拓扑绝缘体. 研究了堆垛对薄膜的影响, 计算发现当堆垛具有中心对称性时, 表面的上下Dirac锥形状基本保持. 当堆垛不具有中心对称性时, Dirac锥发生明显改变, 并且能带有很大的自旋劈裂. 通过计算表明, 非中心对称体系中的自旋劈裂的大小可以通过应变调节.

### 参考文献

- [1] Kane C, Mele E 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 146802
- [2] Bernevig B, Hughes T, Zhang S C 2006 *Science* **314** 1757
- [3] Fu L, Kane C, Mele E 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 106803
- [4] Qi X L, Zhang S C 2011 *Rev. Mod. Phys.* **83** 1057
- [5] Hasan M, Kane C 2010 *Rev. Mod. Phys.* **82** 3045
- [6] Zhang H, Liu C X, Qi X L, Dai X, Fang Z, Zhang S C 2009 *Nat. Phys.* **5** 438
- [7] 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 *Nat. Phys.* **5** 398
- [8] Yu R, Zhang W, Weng H M, Dai X, Fang Z 2010 *Physics* **39** 618 (in Chinese) [余睿, 张薇, 翁红明, 戴希, 方忠 2010 物理 **39** 618]
- [9] Ding Y, Shen J, Pang Y, Liu G T, Fan J, Ji Z Q, Yang C L, Lü L 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 167401 (in Chinese) [丁玥, 沈洁, 庞远, 刘广同, 樊洁, 姬忠庆, 杨昌黎, 吕力 2013 物理学报 **62** 167401]
- [10] Wang X T, Dai X F, Jia H Y, Wang L Y, Liu R, Li Y, Liu X C, Zhang X M, Wang W H, Wu G H, Liu G D 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 023101 (in Chinese) [王啸天, 代学芳, 贾红英, 王立英, 刘然, 李勇, 刘笑闯, 张小明, 王文洪, 吴光恒, 刘国栋 2014 物理学报 **63** 023101]
- [11] Zhang Y, He K, Chang C, Song C, Wang L, Chen X, Jia J, Fang Z, Dai X, Shan W, Shen S, Niu Q, Qi X, Zhang S, Ma X, Xue Q K 2010 *Nat. Phys.* **6** 584
- [12] Liu Y M, Shao H H, Zhou X Y, Zhou G H 2013 *Chin. Phys. B* **22** 077310
- [13] Jia Y F, Guo H M, Qin J H, Chen Z Y, Feng S P 2013 *Chin. Phys. B* **22** 090308
- [14] Li X G, Zhang G F, Wu G F, Chen H, Culcer D, Zhang Z Y 2013 *Chin. Phys. B* **22** 097306
- [15] He K, Ma X C, Chen X, Lu L, Wang Y Y, Xue Q K 2013 *Chin. Phys. B* **22** 067305
- [16] Bao W, Jing L, Velasco J, Lee Y, Liu G, Tran D, Standley B, Aykol M, Cronin S, Smirnov D, Koshino M, McCann E, Bockrath M, Lau C 2011 *Nat. Phys.* **7** 948
- [17] Ishizaka K, Bahramy M, Murakawa H, Sakano M, Shimojima T, Sonobe T, Koizumi K, Shin S, Miyahara H, Kimura A, Miyamoto K, Okuda T, Namatame H, Taniguchi M, Arita R, Nagaosa Kaneko Y, Onose Y, Tokura Y 2011 *Nat. Mater.* **10** 521
- [18] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11169
- [19] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Comput. Mater. Sci.* **6** 15
- [20] Perdew J, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [21] Blöchl P 1994 *Phys. Rev. B* **50** 17953
- [22] Liu W L, Peng X Y, Wei X L, Yang H, Stocks G M, Zhong J X 2013 *Phys. Rev. B* **87** 205315
- [23] Bianchi M, Hatch R C, Mi J, Iversen B B, Hofmann P 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 086802
- [24] King P D C, Hatch R C, Bianchi M, Ovsyannikov R, Lupulescu C, Landolt G, Slomski B, Dil J H, Guan D, Mi J L, Rienks D L, Fink J, Lindblad A, Svensson S, Bao S, Balakrishnan G, Iversen B B, Osterwalder J, Eberhardt W, Baumberger F, Hofmann P 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 096802
- [25] Yang H, Peng X Y, Wei X L, Liu W L, Zhu W G, Xiao D, Stocks G M, Zhong J X 2012 *Phys. Rev. B* **86** 155317
- [26] Sakamoto K, Kakuta H, Sugawara K, Miyamoto K, Kimura A, Kuzumaki T, Ueno N, Annese E, Fujii J, Kodama A, Shishidou T, Namatame H, Taniguchi M, Sato T, Takahashi T, Oguchi T 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 56801
- [27] Liu W L, Peng X Y, Tang C, Sun L Z, Zhang K W, Stocks G M, Zhong J X 2011 *Phys. Rev. B* **84** 245105

# Stacking effects in topological insulator $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ : a first-principles study\*

Chen Yan-Li<sup>1)</sup> Peng Xiang-Yang<sup>1)†</sup> Yang Hong<sup>1)2)‡</sup> Chang Sheng-Li<sup>3)</sup>  
Zhang Kai-Wang<sup>1)</sup> Zhong Jian-Xin<sup>1)</sup>

1) (*Hunan Key Laboratory of Micro-Nano Energy Materials and Devices, Faculty of Materials, Optoelectronics and Physics, Xiangtan University, Xiangtan 411105, China*)

2) (*College of Physical Science and Mechanical Engineering, Jishou University, Jishou 416000, China*)

3) (*College of Science, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*)

( Received 12 April 2014; revised manuscript received 20 May 2014 )

## Abstract

By using first-principles method, we study the stacking effects on the electronic structure, topological phase and spin splitting in the bulk and film of topological insulator  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ . It is found that the different stackings can lead to different interlayer interactions and change the centrosymmetry of  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ . The centrosymmetric ABC and AAA stackings in bulk  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  have similar band structures. ABA stacking breaks the centrosymmetry, giving rise to considerable changes of the band structure and large spin splitting. We further study the stacking effects in the film of  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  and find that the non-centrosymmetric ABA stacking can induce large spin splitting in  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  film. It is proposed and illustrated that the strain can tune the spin splitting effectively.

**Keywords:** topological insulator, topological phase, spin-orbit coupling, spin splitting

**PACS:** 73.20.-r, 73.21.-b, 68.55.-a, 71.15.Mb

**DOI:** 10.7498/aps.63.187303

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11274265, 11464013, 11074211, 11274262), the National Basic Research Program of China (Grant No. 2012CB921303), the Furong Scholar Program of Hunan Provincial Government and the Research Foundation of Education Bureau of Hunan Province, China (Grant No. 10A118), the Talents Recruitment Program of Jishou University, China (Grant No. jsdxrcyjkyxm201309) and the Education Department of Hunan Province, China (Grant No. 14C0939).

† Corresponding author. E-mail: [xiangyang\\_peng@xtu.edu.cn](mailto:xiangyang_peng@xtu.edu.cn)

‡ Corresponding author. E-mail: [yanghong@jsu.edu.cn](mailto:yanghong@jsu.edu.cn)