

$\text{Bi}_2\text{Te}_3$  (111) 和  $\text{Al}_2\text{O}_3$  (0001) 衬底对 Bi (111) 双原子层的电子结构及拓扑性质的影响

孙海明

Effects of  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  (111) and  $\text{Al}_2\text{O}_3$  (0001) substrates on electronic and topological properties of Bi(111) bilayer

Sun Hai-Ming

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 137101 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20220060

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220060>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

Rashba 自旋轨道耦合下 square-octagon 晶格的拓扑相变

Topological phase transitions in square-octagon lattice with Rashba spin-orbit coupling

物理学报. 2018, 67(23): 237101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180624>

环形势阱中自旋-轨道耦合旋转玻色-爱因斯坦凝聚体的基态

Ground state of spin-orbit coupled rotating ferromagnetic Bose-Einstein condensate in toroidal trap

物理学报. 2020, 69(14): 140301 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200372>

梯度磁场中自旋-轨道耦合旋转两分量玻色-爱因斯坦凝聚体的基态研究

Ground state of spin-orbit coupled rotating two-component Bose-Einstein condensate in gradient magnetic field

物理学报. 2018, 67(11): 110302 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180539>

线性塞曼劈裂对自旋-轨道耦合玻色-爱因斯坦凝聚体中亮孤子动力学的影响

Effects of linear Zeeman splitting on the dynamics of bright solitons in spin-orbit coupled Bose-Einstein condensates

物理学报. 2019, 68(8): 080301 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182013>

自旋轨道耦合 Su-Schrieffer-Heeger 原子链系统的电子输运特性

Electron transport through Su-Schrieffer-Heeger chain with spin-orbit coupling

物理学报. 2021, 70(8): 087301 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201742>

磁控溅射法生长  $\text{Bi}_2\text{Te}_3/\text{CoFeB}$  双层异质结太赫兹发射

Terahertz emission generated from  $\text{Bi}_2\text{Te}_3/\text{CoFeB}$  heterostructures grown by magnetron sputtering

物理学报. 2020, 69(20): 200705 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200634>

# $\text{Bi}_2\text{Te}_3(111)$ 和 $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$ 衬底对 $\text{Bi}(111)$ 双原子层的电子结构及拓扑性质的影响

孙海明<sup>†</sup>

(湖南师范大学物理与电子科学学院, 长沙 410081)

(2022 年 1 月 10 日收到; 2022 年 2 月 22 日收到修改稿)

晶体铋沿 (111) 面方向的双原子层及薄膜具有新奇的拓扑性质. 在实验生长或者实际应用中, 其必然与衬底接触. 本文采用紧束缚近似方法与第一性原理计算研究了  $\text{Bi}$  双原子层及其与  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  和  $\text{Al}_2\text{O}_3$  衬底形成的异质结的电子结构. 计算结果表明,  $\text{Bi}$  双层是具有 0.2 eV 的半导体. 当其具有拓扑表面态的  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  形成异质结时, 两者电子态之间有很强的杂化, 不利于  $\text{Bi}(111)$  双层拓扑电子态的观测. 将其放在绝缘体  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  时, 导带与价带与衬底电子态杂化较小, 并且展现出巨大的 Rashba 自旋劈裂. 这是由于衬底诱导  $\text{Bi}(111)$  双原子层中心反演对称性破缺和自旋-轨道耦合共同作用的结果. 进一步采用紧束缚近似计算得到的结果发现, 衬底  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  对  $\text{Bi}(111)$  双层的作用等效于一个约为 0.5—0.6 V/Å ( $1 \text{ Å} = 0.1 \text{ nm}$ ) 的外电场. 此外,  $\text{Bi}(111)$  双原子层与衬底  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  电子态之间的强杂化会导致其发生拓扑相变, 即由二维拓扑绝缘体转变为平庸的绝缘体. 本文为人们在  $\text{Bi}(111)$  双层的生长和将其进行实际应用时如何选择合适的衬底并进行电子性质的调控提供了指导作用.

**关键词:**  $\text{Bi}(111)$  双原子层, Rashba 效应, 拓扑性质, 自旋-轨道耦合

**PACS:** 71.20.Nr, 71.20.-b, 71.70.Ej, 71.90.+q

**DOI:** 10.7498/aps.71.20220060

## 1 引言

晶体中受对称性保护的拓扑电子态可以诱导如量子自旋霍尔效应、量子反常霍尔效应以及马约拉纳费米子 (Majorana fermion) 等许多新奇效应和现象, 并且在拓扑量子计算方面有良好的应用前景<sup>[1–5]</sup>. 二维拓扑绝缘体在基于上述效应的器件小型化方面具有较大的优势.  $\text{HgTe}/\text{CdTe}$  量子阱是首个理论预言并被实验上证实的二维拓扑绝缘体材料<sup>[6,7]</sup>. 然而, 实验中要想获得理想的二维量子阱材料并不容易. 与  $\text{HgTe}/\text{CdTe}$  量子阱相比, 层状二维拓扑绝缘体则具有易生长、易集成的优势.

晶体铋具有层状结构, 沿其 (111) 方向, 层与层之间相互作用较弱, 可从其块体相获得少层及薄

膜结构. 理论预言  $\text{Bi}(111)$  双原子层 ( $\text{Bi}(111)$  bilayer, 1BL-Bi) 及薄膜是二维拓扑绝缘体<sup>[8,9]</sup>. 因此, 这类体系迅速引起了广泛关注<sup>[10–20]</sup>. 实验方面, 研究人员先后通过分子束外延生长在拓扑绝缘体  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  以及  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  等表面得到了 1BL-Bi, 并利用扫描隧道显微镜 (scanning tunneling microscope, STM) 和角分辨光电子谱 (angle-resolved photoemission spectroscopy, ARPES) 实验研究了其电子结构. 结果发现, 这类界面结构可能存在拓扑边缘态<sup>[10,11]</sup>. 在上述界面结构中, 界面相互作用还可以用来调控拓扑绝缘体中的狄拉克表面电子态<sup>[13]</sup>. 此外, 两者之间的界面相互作用诱导表面 1BL-Bi 中出现 Rashba 自旋劈裂<sup>[17]</sup>. 然而, 上述研究也表明, 拓扑绝缘体  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  衬底与 1BL-Bi 的电子态所处能量相近, 因此在异质结中两者的能带混杂在一起,

<sup>†</sup> 通信作者. E-mail: 201930132023@hnnu.edu.cn

不利于 1BL-Bi 中电子态的观测<sup>[13,17]</sup>. 最近, 第一性原理计算研究表明, 将 1BL-Bi 与绝缘体  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  形成异质结界面可以避免界面相互作用引起的能带杂化<sup>[21]</sup>.

本文采用第一性原理计算和紧束缚近似方法研究了 1BL-Bi 与  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  薄膜和  $\text{Al}_2\text{O}_3$  衬底形成的异质结的电子结构, 即 1BL-Bi/ $\text{Bi}_2\text{Te}_3(111)$  和 1BL-Bi/ $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$ . 第一性原理计算结果发现,  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  衬底上的 1BL-Bi 没有明显的 Rashba 劈裂, 并且两者电子态之间的杂化较严重. 相反, 对于 1BL-Bi/ $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  异质结, 在费米能级附近有巨大 Rashba 劈裂. 进一步采用紧束缚近似计算分析了产生 Rashba 劈裂的物理原因, 并估算了衬底诱导的有效电场大小.

## 2 计算方法

第一性原理电子结构计算采用维也纳从头计算模拟软件包 (Vienna *Ab initio* Simulation Package, VASP 软件包)<sup>[22]</sup>. 其中, 电子与原子核之间的赝势采用投影缀加平面波方法 (projector augmented wave method, PAW) 产生<sup>[23,24]</sup>; 电子与电子

之间的交换关联泛函采用基于广义梯度近似 (generalized gradient approximation, GGA) 的 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 泛函<sup>[25]</sup>. 表面 Bi(111) 双原子层与衬底的层间相互作用考虑了范德瓦耳斯 (van de Waals, vdW) 修正, 采用 DFT-D3 色散校正<sup>[26]</sup>; 平面波截断能为 400 eV. 紧束缚近似计算采用-Slater-Koster 提出的方法, 即哈密顿量矩阵元的双中心积分用成键参量拟合<sup>[27]</sup>.

## 3 结果与讨论

### 3.1 Bi(111) 双原子层

晶体 Bi 具有层状结构, 层与层之间以较弱的范德华力结合, 有利于人们采用机械剥离法或者分子束外延生长得到层状薄膜结构. 1BL-Bi 的几何结构和能带如图 1(a) 和 (b) 所示. 其几何结构与硅烯类似, 具有六角蜂窝状结构. 原胞内有两个原子, 但其中一个原子相对于另一个原子向面外翘曲, 呈现出褶皱结构. 因此, 从侧面看, 一个完整的层状结构有两个原子层. 故而人们将这种结构称 Bi(111) bilayer 或 Bi(111) 双原子层. 其平衡时的晶格常数大约为 4.53 Å, 两原子坐标沿面外  $z$  方向

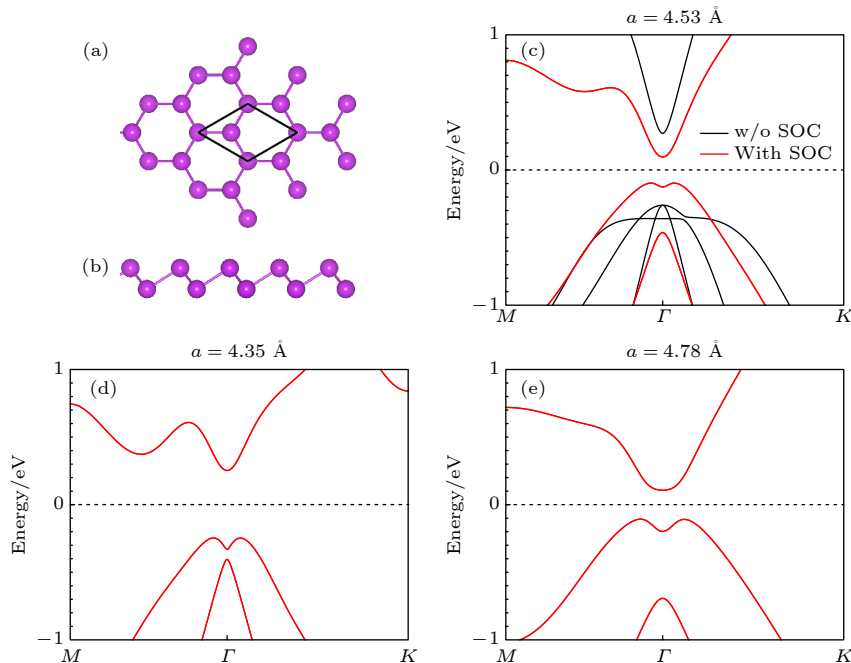


图 1 1BL-Bi 的几何结构和能带 (a) (b) 结构的俯视图和侧视图; (c) 平衡体积时的能带; (d) (e) 减小和增大晶格常数时的能带结构, 其数值对应  $\text{Bi}_2\text{Te}_3(111)$  和  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  的晶格常数. (a) 图中的菱形代表原胞, (c)–(e) 图中的虚线代表费米能级

Fig. 1. Geometric and band structures of 1BL-Bi: (a) (b) Top and side views of the structure; (c) band structure for the equilibrium lattice constant; (d) (e) band structures for a decreased and enlarged lattice constant, respectively. The black box in (a) represents the primitive cell. The dashed lines in (c)–(e) denote the Fermi level.

之差大约为 1.66 Å. 这种褶皱结构便于应力调控. 特别是在衬底应力的作用下, 可以调整两原子  $z$  方向的相对间距而使其面内晶格常数与衬底一致. 当面内晶格常数减小时, 两原子坐标沿  $z$  方向之差增大. 相反, 当面内晶格常数增大时, 沿  $z$  方向坐标之差减小. 例如, 当晶格常数减小到 4.35 Å, 两原子  $z$  坐标之差增大到 1.74 Å. 而晶格常数增大到 4.78 Å 时,  $z$  坐标之差则减小到 1.56 Å.

图 1(c) 给出了具有块体晶格常数 1BL-Bi 的能带结构. 由于 Bi 原子具有很大的内禀自旋-轨道耦合 (spin-orbit coupling, SOC), 因此, 计算中考虑了 SOC 对能带结构的影响. 从图中可以看出, 未考虑 SOC 时, 1BL-Bi 是一个具有大约 0.5 eV 能隙的半导体, 且价带顶和导带底都位于  $\Gamma$  点. 考虑 SOC 后, 能隙减小到大约 0.2 eV, 且在  $\Gamma$  点附近价带出现凹陷, 与拓扑绝缘体  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  类似. 图 1(d) 和 (e) 分别给出了当 1BL-Bi 晶格常数取值与  $\text{Bi}_2\text{Te}_3(111)$  和  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  相同并考虑 SOC 时的能带结构. 可以看出, 当 1BL-Bi 的晶格常数缩小到 4.35 Å 时, 其带隙增大到大约 0.5 eV. 而当其晶格常数增加到 4.78 Å 时, 带隙仅增大到大约 0.02 eV. 计算结果表明, 上述体系的  $Z_2$  拓扑数均为 1. 因此, 在没有衬底的情况下, 这些体系全部二维拓扑绝缘体.

### 3.2 Bi/ $\text{Bi}_2\text{Te}_3(111)$ 和 Bi/ $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$

讨论衬底对表面 1BL-Bi 电子结构的影响. 本文计算中,  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  衬底的晶格常数约为 4.38 Å, 而  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  的晶格常数为 4.78 Å. 两者的晶格常数与 1BL-Bi 的 4.53 Å 相差 3.3% 和 5.5%. 由于 1BL-Bi 具有褶皱结构, 因此, 其可以通过调整褶皱使晶格常数很好地与衬底匹配. 前人的实验很好地验证了这一特征<sup>[10,11]</sup>.  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  衬底的厚度约为 11 Å, 即 6 个  $\text{Al}_2\text{O}_3$  单元的厚度. 图 2 给出了左侧给出 Bi/1QL- $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  四种构型 (用 C1, C2, C3 和 C4 表示) 的俯视图和侧视图. Bi/3QL- $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  与其类似, 差别在于衬底有 3 个 QL. 在这几个构型中, C1 的能量最低.

图 2 右侧给出的是考虑 SOC 计算得到的 Bi/ $\text{Bi}_2\text{Te}_3(111)$  的能带结构. 其中衬底  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  的厚度用五原子层 (quintuple layer, QL) 的层数标定. 例如, 当衬底厚度为 1 个 QL 时, 用 1QL- $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  表示. 如图 2(a) 所示, 1QL- $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  是带隙约为 0.4 eV 的半导体. 当 1BL-Bi 与 1QL- $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  形成 Bi/1QL- $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  异质结时, 界面相互作用对两者的能带产生显著影响. 首先, 异质结的能隙减小到大约 0.1 eV. 此外, 异质结的导带能量位置很低: 在  $M$  点位于 0.25 eV 处, 而在  $K$  点则位于 0.65 eV,

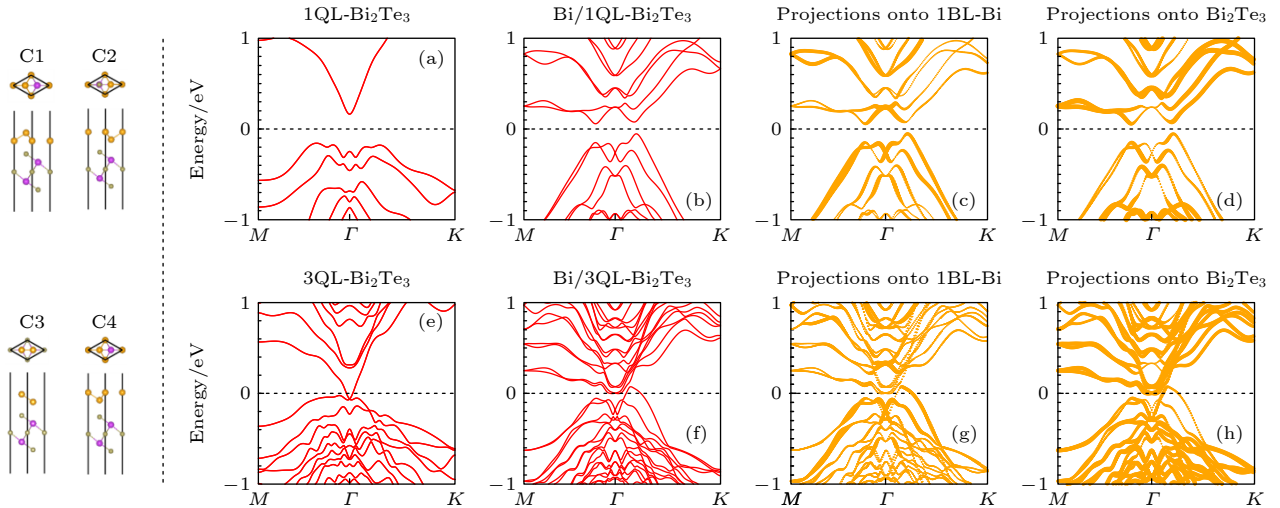


图 2 Bi/ $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  异质结界面的结构和能带. 左侧给出 Bi/1QL- $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  四种构型 (用 C1, C2, C3 和 C4 表示) 的俯视图和侧视图. Bi/3QL- $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  与其类似, 差别在于衬底有 3 个 QL. (a) 1QL- $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  的能带结构; (b) Bi/1QL- $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  的能带结构; (c) 和 (d) 分别代表将能带投影到 1BL-Bi 和衬底 1QL- $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ ; (e) 1QL- $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  的能带结构; (f) Bi/3QL- $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  的能带结构; (g) 和 (h) 分别代表将能带投影到 1BL-Bi 和衬底 3QL- $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ . 图 (c), (d), (g) 和 (h) 给出的是 1BL-Bi 或者  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  在异质结能带中所占的权重.

Fig. 2. Geometric and band structures of Bi/ $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  heterostructures: Left panel shows the geometric structures of four configurations for Bi/1QL- $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ , which are denoted as C1, C2, C3, and C4, respectively. The geometric structure for Bi/3QL- $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  are similar to those for Bi/1QL- $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ . (a) For the free-standing 1QL- $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  and (b) for Bi/1QL- $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ ; (c) and (d) show the layer-projections of the band structure onto 1BL-Bi and 1QL- $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ , respectively; (e)–(h) corresponding plots for Bi/3QL- $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ .

并且沿高对称线  $\Gamma$ -M 和  $\Gamma$ -K 均出现了能带劈裂. 这在图 1(d) 及图 2(a) 所给的孤立体系的能带中没有看到的. 类似的能带被推低和劈裂的现象也出现价带. 图 2(c) 和 (d) 分别给出了将异质结波函数投影到 1BL-Bi 和 1QL-Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 时的能带结构. 从图中可以看出, 价带主要由 1BL-Bi 贡献, 而导带主要由 1QL-Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 贡献. 图 2(c) 的能带结构表明, 由于受衬底的影响, 1BL-Bi 价带沿  $\Gamma$ -K 方向出现了明显的劈裂. 而图 2(d) 表明, 1QL-Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 的导带由于界面相互作用被推至低能区, 并且发生了劈裂. 与 Bi/Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 相比, 1BL-Bi 中几乎看不到 Rashba 效应导致的自旋劈裂.

实验中 Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 的厚度远超 1 个 QL, 且当其厚度达到 3 个 QL 时, 出现狄拉克表面电子态. 为考查狄拉克表面电子态对表面 1BL-Bi 能带结构的影响, 图 2(e)–(h) 给出了 Bi/3QL-Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 的能带结构. 其中, 关于衬底 3QL-Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 的能带结构与前人的第一性原理计算结果一致<sup>[28,29]</sup>. 比较图 2(e) 和 (f) 的结果可知, 与 Bi/1QL-Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 类似, 界面相互作用也将 3QL-Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 的能带推至低能区. 从图 2(g) 可以看出, 当衬底 Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 更厚时, 1BL-Bi 的电子态受到更严重的破坏. 而图 2(h) 的结果显示, 3QL-Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 的表面电子态也受杂化的影响而在费米能级附近打开了一个能隙. 但是, 位于  $\Gamma$  点处约 -0.3 eV 的能带交叉表明, 狄拉克点仍然得到保持, 证明了其拓扑保护的鲁棒性.

从图 2 结果可以看出, 当衬底越接近金属时, 1BL-Bi 与衬底电子态之间的杂化越强. 为了使 1BL-Bi 的电子态受衬底的影响尽可能小, 衬底应当是绝缘体. 第一性原理计算表明, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(0001) 是一

种带隙约为 5 eV 的绝缘体, 并且在许多材料的生长中作为衬底. 此外, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(0001) 的晶格常数与 1BL-Bi 接近, 因而适合做 1BL-Bi 的衬底. 最近的研究结果表明, Al-终端的 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(0001) 可以与 Pb, Bi 等单层形成异质结, 并且能够很好地保持表面单层的几何形貌和电子结构<sup>[21]</sup>. 本文所 Bi/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(0001) 采用的结构与文献<sup>[21]</sup>报道的一致. 图 3 给出了 Bi/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(0001) 的能带结构, 与前人的计算结果一致<sup>[21]</sup>. 从图 3(a) 可以看出, 考虑 SOC 后, 能带发生了类似 Rashba 效应产生的劈裂. 进一步投影到 1BL-Bi 的能带结构显示, 在费米能级附近的电子态几乎全部由 Bi 原子的 p 轨道贡献 (见图 3(b)). 因此, 上述能带劈裂是由于 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(0001) 衬底破坏了 1BL-Bi 的中心反演对称性和 SOC 共同作用的结果. 此外, 在 Bi/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(0001) 中表征 Rashba 劈裂的 Rashba 能量  $E_R$  大约为 160 meV, Rashba 参数  $\alpha_R$  约为 1.6 eV Å, 比块体 Bi(111) 表面大一个数量级<sup>[30,31]</sup>.

### 3.3 紧束缚近似计算

采用紧束缚近似方法 (tight-binding, TB) 进一步理解界面诱导的 SOC 劈裂. 紧束缚近似计算中自旋-轨道耦合相互作用采用内禀原子自旋-轨道耦合项:  $H_{\text{SOC}} = \lambda \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ . 其中,  $\lambda$  为自旋-轨道耦合强度. 该式表明, s 轨道的自旋-轨道为 0. 因此, 在 TB 计算中只对 Bi 原子的 p 轨道考虑自旋-轨道耦合相互作用,  $\lambda$  取为 1.23 eV. 图 4(a) 和表 1 分别给出了紧束缚近似拟合的能带和参数. TB 拟合与第一性原理计算结果总体符合较好. 考虑到界面诱导 1BL-Bi 中心反演对称性破缺, 因此, 导致原胞

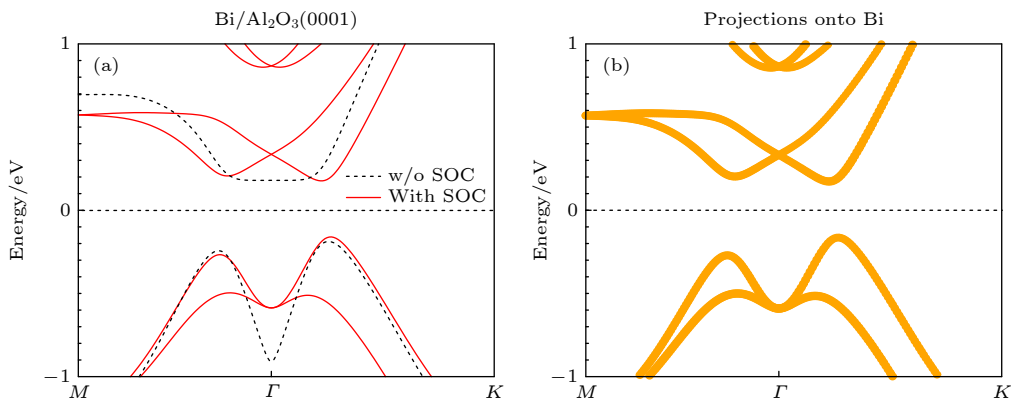


图 3 绝缘体 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 对 1BL-Bi 电子结构的影响 (a) Bi/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(0001) 异质结界面的能带; (b) 异质结能带在 1BL-Bi 上的投影  
Fig. 3. Effects of insulating Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> on the band structure of 1L-Bi: (a) The band structure of Bi/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(0001); (b) layer-projection of the band structure onto 1L-Bi.

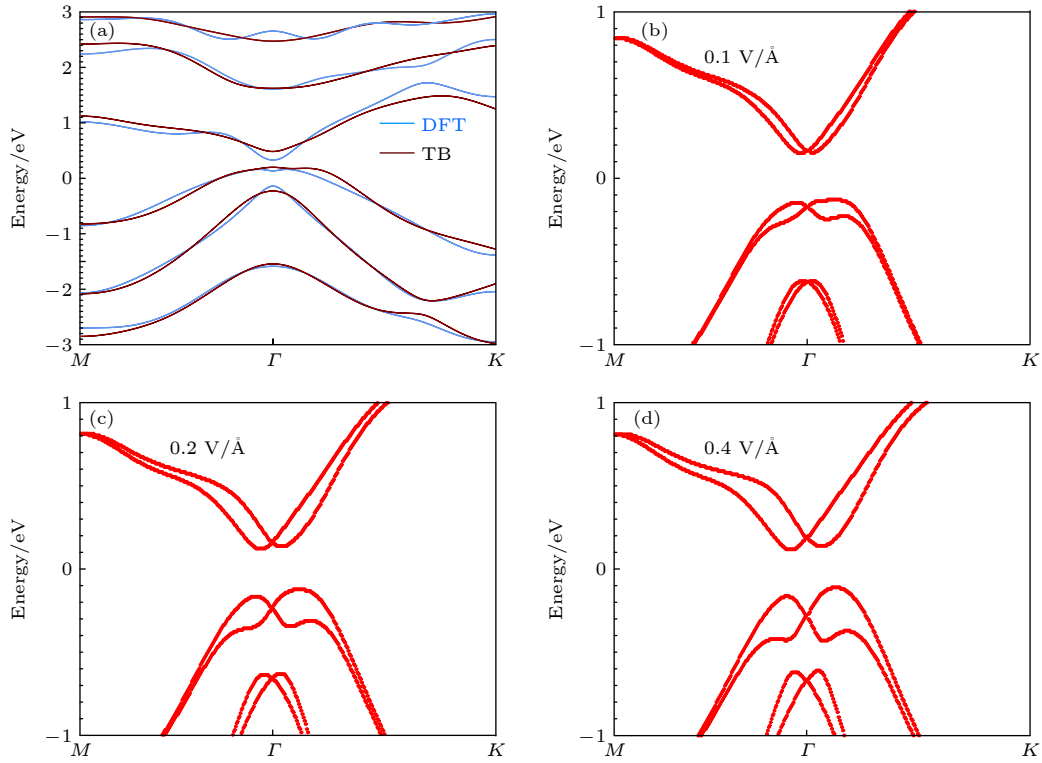


图 4 电场对 1BL-Bi 能带结构的影响 (a) 能带结构的紧束缚近似拟合; (b)–(d) 不同电场作用下紧束缚近似计算得到的能带结构  
Fig. 4. Effects of electric field on the band structure of 1L-Bi: (a) Tight-binding fitting of the band structure of 1L-Bi; (b)–(d) band structures of 1L-Bi under different electric fields derived from the tight-binding method.

中的两个 Bi 原子的在位能  $\varepsilon$  出现差异. 这种效果等效于对 1BL-Bi 施加了一个垂直电场  $E = \Delta\varepsilon/\Delta z$ . 其中  $\Delta\varepsilon$  和  $\Delta z$  分别代表原胞中的两个 Bi 原子在位能和  $z$  坐标之差. 图 4(b) 给出了  $E = 0.1 \text{ V/\AA}$  时的能带结构. 可以看出, 与图 4(a) 中无外电场的

能带相比, 施加外电场后价带和导带都出现了劈裂. 继续增大  $E$  到 0.2 和 0.4  $\text{V/\AA}$ , 劈裂也随之增大. 因此, 这种劈裂是 Rashba 效应导致的自旋劈裂. 将 TB 计算得到导带的自旋劈裂与第一性原理计算结果相比较可以得出, 与  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  衬底的界面对 1BL-Bi 的作用等效于一个 0.5–0.6  $\text{V/\AA}$  外电场的作用.

### 3.4 拓扑性质

上述结果表明, 1BL-Bi 与衬底的界面相互作用对其能带结构有重要影响. 因此, 随之而来的问题是这种界面相互作用是否会影响其非平庸的拓扑性质. 基于上述计算, 采用 Yu 等 [32] 提出的方法可以计算  $Z_2$  拓扑数, 从而可以知道 1BL-Bi 的拓扑性质. 对于  $\text{Bi}/\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$ , 费米能级附近 Bi 的电子态保持得较好, 并且文献 [21] 的第一性原理计算表明,  $\text{Bi}/\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  的  $Z_2$  为 1, 因而是拓扑绝缘体. 图 5 给出了  $\text{Bi}/1\text{QL-Bi}_2\text{Te}_3(111)$  的 Wilson Loop (Wannier charge center). 由此可以得到  $\text{Bi}/1\text{QL-Bi}_2\text{Te}_3(111)$  的  $Z_2$  为 0. 因此, 1BL-Bi 在 1QL- $\text{Bi}_2\text{Te}_3(111)$  是平庸的绝缘体. 其原因可能是两者

表 1 1BL-Bi 的紧束缚近似参数.  $\varepsilon_\alpha$  代表  $\alpha$  轨道的在位能 (on-site energy);  $V_{\alpha\beta\sigma}$  和  $V_{\alpha\beta\pi}$  分别代表  $\alpha$  和  $\beta$  轨道形成  $\sigma$  键和  $\pi$  键的跃迁参数. SOC 强度  $\lambda$  为 1.23 eV

Table 1. Tight-binding parameters for 1BL-Bi.  $\varepsilon_\alpha$  denotes the on-site energies of orbital  $\alpha$ .  $V_{\alpha\beta\sigma}$  and ( $V_{\alpha\beta\pi}$ ) denotes the hopping parameter for  $\sigma(\pi)$  bond between orbitals  $\alpha$  and  $\beta$ .

On-site/eV				
$\varepsilon_s$	$\varepsilon_{px}$	$\varepsilon_{py}$	$\varepsilon_{pz}$	
-9.477	-1.383	0.624	-0.154	
Hopping/eV				
	$V_{ss\sigma}$	$V_{sp\sigma}$	$V_{pp\sigma}$	$V_{pp\pi}$
1 <sup>st</sup> NN	-0.455	1.439	1.718	-0.646
2 <sup>nd</sup> NN	0.001	0.315	0.168	-0.013
3 <sup>rd</sup> NN	0.019	0.278	0.162	-0.123
4 <sup>th</sup> NN	-0.112	-0.096	0.162	-0.067
5 <sup>th</sup> NN	-0.046	0.037	0.000	0.028

电子态之间的强杂化改变了 1BL-Bi 的能带特征. 由图 2 可知, 当衬底厚度增加到 3QL 时, 1BL-Bi 与衬底电子态之间的杂化继续增强. 因此, 可以推断, 1BL-Bi 在  $\text{Bi}_2\text{Te}_3(111)$  可能都是平庸的绝缘体.

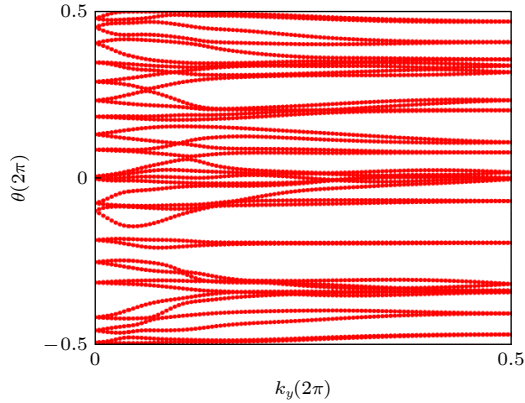


图 5 Bi/1QL- $\text{Bi}_2\text{Te}_3(111)$  旺尼尔电荷中心的演化  
Fig. 5. Evolution of the Wannier charge center for Bi/1QL- $\text{Bi}_2\text{Te}_3(111)$ .

## 4 结 论

本文采用第一性原理计算和紧束缚近似方法研究了  $\text{Bi}_2\text{Te}_3(111)$  薄膜和  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  衬底对表面 1BL-Bi 电子结构的影响. 结果发现, 具有半导体性质的 1QL- $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  与 1BL-Bi 的电子态有严重的杂化. 当  $\text{Bi}_2\text{Te}_3(111)$  薄膜增大到 3 个 QL 时, 衬底出现狄拉克表面电子态, 此时两者电子态之间的杂化进一步增强, 并且没有明显的 Rashba 劈裂. 相反, 当 1BL-Bi 与  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  形成异质结时, 在费米能级附近的能带出现很大的 Rashba 劈裂. 其物理机制是由于衬底的出现导致 1BL-Bi 中心反演对称性破缺和 Bi 原子中强 SOC 共同作用的结果. 进一步的紧束缚近似计算发现,  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  衬底对 1BL-Bi 电子结构的影响可以等效于一个约为 0.5—0.6 V/Å 的外电场. 此外, 计算了 1BL-Bi/1QL- $\text{Bi}_2\text{Te}_3(111)$  的 Wilson loop, 结果发现 1BL-Bi 在  $\text{Bi}_2\text{Te}_3(111)$  转变为平庸的绝缘体. 本文为研究者在基于 1BL-Bi 的实验生长和器件制备中如何衬底并进行电子态的调控提供了指导作用.

## 参考文献

- [1] Kane C L, Mele E J 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 146802
- [2] Fu L, Kane C L, Mele E J 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 106803
- [3] Moore J E 2010 *Nature* **464** 194
- [4] Hasan M Z, Kane C L, 2010 *Rev. Mod. Phys.* **82** 3045
- [5] Qi X L, Zhang S C, 2011 *Rev. Mod. Phys.* **83** 1057
- [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] Murakami S 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 236805
- [9] Liu Z, Liu C X, Wu Y S, Duan W H, Liu Feng, Wu J 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 136805
- [10] Hirahara T, Bihlmayer G, Sakamoto Y, Yamada M, Miyazaki H, Kimura S, Blügel S, Hasegawa S 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 166801
- [11] Yang F, Miao L, Wang Z F, Yao M Y, Zhu F F, Song Y R, Wang M X, Xu J P, Fedorov A V, Sun Z, Zhang G B, Liu C H, Liu F, Qian D, Gao C L, Jia J F 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 016801
- [12] Chen M, Peng J P, Zhang H M, Wang L L, He K, Ma X C, Xue Q K 2012 *Appl. Phys. Lett.* **101** 081603
- [13] Chang C Z, Tang P, Feng X, Li K, Ma X C, Duan W, He K, Xue Q K 2015 *Phys. Rev. Lett.* **115** 136801
- [14] Shokri R, Meyerheim H L, Roy S, Mohseni K, Ernst A, Otrokov M M, Chulkov E V, Kirschner J 2015 *Phys. Rev. B* **91** 205430
- [15] Yao M Y, Zhu F F, Han C Q, Guan D D, Liu C H, Qian D, Jia J F 2016 *Sci. Rep.* **6** 21326
- [16] Schouteden K, Govaerts K, Debeheis J, Thupakula U, Chen T, Li Z, Netsou A, Song F Q, Lamoen D, Haesendonck C V, Partoens B, Park K 2016 *ACS Nano* **10** 8778
- [17] Su S H, Chuang P Y, Chen S W, Chen H Y, Tung Y, Chen W C, Wang C H, Yang Y W, Huang J C A, Chang T R, Lin H, Jeng H T, Cheng C M, Tsuei K D, Su H L, Wu Y C 2017 *Chem. Mater.* **29** 8992
- [18] Zhu H S, Zhou W M, Yarmoff J A 2018 *Thin Solid Films* **660** 343
- [19] Zhu H S, Zhou W M, Yarmoff J A 2018 *J. Phys. Chem. C* **122** 16122
- [20] Hu J P, He B C, Wang H B, Zhang H, Huang C Q, Xie L, Guo X, Chen S, Huang H, Song F 2022 *Acta Phys. Sin.* **72** 026101 (in Chinese) [胡金平, 何丙辰, 王红兵, 张欢, 黄朝钦, 谢磊, 郭晓, 陈石, 黄寒, 宋飞 2022 物理学报 **72** 026101]
- [21] Chen M, Liu F 2021 *Natl. Sci. Rev.* **8** nwaa241
- [22] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11169
- [23] Blochl P E 1994 *Phys. Rev. B* **50** 17953 31
- [24] Kresse G, Joubert D 1999 *Phys. Rev. B* **59** 1758
- [25] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [26] Grimme S, Antony J, Ehrlich S, Krieg S 2010 *J. Chem. Phys.* **132** 154104
- [27] Slater J C, Koster G F 1954 *Phys. Rev.* **94** 1498
- [28] Maassena J, Lundstrom M 2013 *Appl. Phys. Lett.* **102** 093103
- [29] Acosta C M, Lima M P, Silva A J R D, Fazzio A, Lewenkopf C H 2018 *Phys. Rev. B* **98** 035106
- [30] Hirahara T, Nagao T, Matsuda I, Bihlmayer G, Chulkov E V, Koroteev Y M, Echenique P M, Saito M, Hasegawa S 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 146803
- [31] Hirahara T, Nagao T, Matsuda I, Bihlmayer G, Chulkov E V, Koroteev Y M, Hasegawa S 2007 *Phys. Rev. B* **75** 035422
- [32] Yu R, Qi X L, Bernevig A, Fang Z, Dai X 2011 *Phys. Rev. B* **84** 075119

# Effects of $\text{Bi}_2\text{Te}_3(111)$ and $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$ substrates on electronic and topological properties of $\text{Bi}(111)$ bilayer

Sun Hai-Ming<sup>†</sup>

(School of Physics and Electronics, Hunan Normal University, Changsha 410081, China)

( Received 10 January 2022; revised manuscript received 22 February 2022 )

## Abstract

The bilayer and thin films of  $\text{Bi}(111)$  have demonstrated novel topological properties. Here, we investigate the electronic structures of  $\text{Bi}/\text{Bi}_2\text{Te}_3(111)$  and  $\text{Bi}/\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  by combining first-principles and tight-binding approximation calculations. Our results show that the  $\text{Bi}(111)$  bilayer is a semiconductor with a gap of about 0.2 eV. Its electronic states are strongly disturbed by the interaction with  $\text{Bi}_2\text{Te}_3(111)$  thin films, no matter whether the substrate has a band gap or Dirac surface state. Moreover, it is hard to see Rashba-type band splittings in such systems. In contrast, it demonstrates clean and giant Rashba-type splittings as strongly hybridized with insulating  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$ , which is due to the broken inversion symmetry induced by interfacing and the strong atomic spin-orbit coupling in Bi. Our tight-binding approximation analyses further reveal that the effect of substrate  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  on the band structure of the  $\text{Bi}(111)$  bilayer is equivalent to the action of external electric field in a range between 0.5 and 0.6 V/Å. Moreover, we find that the strong hybridization between  $\text{Bi}(111)$  bilayer and the electronic state of the substrate  $\text{Bi}_2\text{Te}_3(111)$  can lead to a topological phase transition, i.e. the change from a two-dimensional topological insulator into a mediocre insulator. Our study thus provides an insight into the interface-engineering of electronic states of  $\text{Bi}(111)$  bilayer.

**Keywords:**  $\text{Bi}(111)$  bilayer, Rashba effect, topological properties, spin-orbit coupling

**PACS:** 71.20.Nr, 71.20.-b, 71.70.Ej, 71.90.+q

**DOI:** 10.7498/aps.71.20220060

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: 201930132023@hunnu.edu.cn