

二维拓扑绝缘体退相干效应研究^{*}

江 华^{1,†} 成淑光² 孙庆丰³ 谢心澄^{1,4}

(1 北京大学国际量子材料科学中心 北京 100871)

(2 西北大学物理系 西安 710069)

(3 中国科学院物理研究所 北京 100190)

(4 美国奥克拉荷马州立大学物理系 奥克拉荷马州 74078)

摘 要 拓扑绝缘体是当前凝聚态物理研究的热点. 退相干效应对该体系的影响的研究不仅有重要的理论意义, 而且也是实现未来量子器件的不可或缺的前期工作. 文章作者从理论上研究了退相干对二维拓扑绝缘体特别是量子自旋霍尔效应的影响. 研究结果表明, 作为量子自旋霍尔效应的标志的量子化纵向电阻平台对不破坏自旋记忆的退相干效应(普通退相干)不敏感, 但却对破坏自旋记忆的退相干效应(自旋退相干)非常敏感. 因此, 该量子化平台只能在尺寸小于自旋退相干长度的介观样品中存在, 从而解释了量子自旋霍尔效应实验中所观测到的结果(见 *Science*, 2007, 318:766). 同时, 文章作者还定义了一个新的物理量, 即自旋霍尔电阻, 并发现该自旋霍尔电阻也有量子化平台. 特别是该量子化平台对两种类型的退相干都不敏感. 这说明在宏观样品中也能观测到自旋霍尔电阻的量子化平台, 因此更能全面地反映量子自旋霍尔效应的拓扑特性.

关键词 拓扑绝缘体, 量子自旋霍尔效应, 退相干

Two-dimensional dephasing effects in topological insulators

JIANG Hua^{1,†} CHENG Shu-Guang² SUN Qing-Feng³ XIE Xin-Cheng^{1,4}

(1 International Center for Quantum Materials, Peking University, Beijing 100871, China)

(2 Department of Physics, Northwest University, Xian 710069, China)

(3 Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

(4 Department of Physics, Oklahoma State University, Stillwater, Oklahoma 74078, USA)

Abstract Topological insulator is one of the most attractive areas in condensed matter physics in recent years. The study of the dephasing effect in such systems has important theoretical meanings and meanwhile, is inevitable for the realization of future quantum devices. In our studies of the influence of dephasing on the two-dimensional topological insulator, especially the quantum spin Hall effect, we find that the quantized longitudinal resistance plateaus are robust against normal dephasing but fragile to spin dephasing. Thus, these quantized plateaus can only survive in mesoscopic samples in which the spin coherence length is smaller than the sample size. Our results are in excellent agreement with experiments (*Science*, 2007, 318:766). In addition, we define a new spin Hall resistance that also exhibits quantum plateaus, which are robust against both normal and spin dephasings. These novel quantum plateaus can thus survive in macroscopic samples and better reflect the topological nature of the quantum spin Hall effect.

Keywords topological insulator, quantum spin Hall effect, dephasing

1 拓扑绝缘体与退相干效应简介

拓扑绝缘体及其相关物理现象是当前凝聚态物

^{*} 国家自然科学基金(批准号:10734110;10974236)、中国博士后基金(批准号:20100480147)资助项目

2011-05-06 收到

[†] 通讯联系人. Email:jianghua05@pku.edu.cn

理中的一个研究热点,无论在基础物理研究还是无能耗自旋电子器件设计方面它都具有举足轻重的地位^[1,2]. 拓扑绝缘体完全不能用传统的“绝缘体”来描述;而要用一种全新的量子物质态来描述. 它的体电子态是有能隙的绝缘态;而它的表面(对三维体系)或者边缘(对二维体系)电子态则是无能隙的金属态. 这种表面金属态的出现完全是由材料体电子态的数学拓扑结构(拓扑序)决定. 由于拓扑绝缘态的拓扑序需要使用拓扑不变量来表征,这些拓扑不变量是离散的整数或分数,它们不能连续地改变. 因此拓扑绝缘体的表面金属态与表面的具体结构无关,它能非常稳定地存在,不受体系中的缺陷和杂质等的影响.

强磁场引起的量子霍尔效应是最早发现的拓扑绝缘体体系^[3]. 在该体系中,霍尔电阻表现出不受外界干扰所影响的量子化平台. 它的发现对现代物理学产生了深远的影响,并且有 2 次共 4 人因此而获得诺贝尔物理学奖. 近几年来,人们陆续预言并在实验中证实了几种二维或三维材料能形成全新的拓扑绝缘态^[4-8]. 这类拓扑绝缘态是由材料自身的强自旋轨道耦合结合特殊的能带结构而产生的,是材料的内性质质的反映. 由于它不需要外加磁场,因此能保持体系的时间反演对称性. 不同于由第一类 Chern 数来表征的量子霍尔效应拓扑体系^[9],这类拓扑绝缘态的拓扑序使用 Z_2 拓扑数^[10]来表征. 量子自旋霍尔效应是该类拓扑绝缘态在二维情况下的表现形式. 在量子自旋霍尔效应体系中,强自旋轨道耦合会使得体能带打开一个带隙,并在带隙内建立起螺旋(helical)边缘态能带. 这一独特的能带结构,保证了当样品化学势位于体带隙中时,载流子只能沿着边界传输,而且对于同一边界来说,不同自旋的载流子的传输方向完全相反. 这种边缘态输运方式使得量子自旋霍尔效应体系的霍尔电阻为零,而纵向电阻却表现出量子化平台. 量子自旋霍尔效应最早是在单层石墨烯样品中提出的,随后很快被推广到其他二维和三维体系^[1,2]. 特别是张首晟组预言了在合适宽度的 HgTe/CdTe 半导体量子阱中会形成能带倒置结构,从而量子自旋霍尔效应能在该体系中出现^[5]. 随后,他们的理论预测被德国的实验组所证实. 在实验中,他们测量了纵向电阻,并在零磁场下的介观样品中观测到量子化的纵向电阻平台,从而间接证实了量子自旋霍尔效应及其拓扑性质^[6]. 尽管如此,该量子化平台仅仅出现在介观尺度样品中;当样品尺度变大时,尽管平台属性还能够保持,但是其值已经远远偏离了量子化值. 与之相对应

的量子霍尔效应,它的量子化霍尔电阻平台能够在宏观尺度很好保持. 在考察了各种因素之后,我们提出退相干可能会破坏量子自旋霍尔效应纵向电阻的量子化平台.

在实际材料中,存在着各种各样的能导致波函数相位随机化(波函数相位随机化称为退相干)的非弹性散射机制,它们大致可以分为两类:在第一类中,载流子仅仅丢失相位记忆而保留自旋记忆,如电子-电子相互作用,电-声子相互作用等等导致的退相干过程都属于这一类,它们被称为普通退相干;在另一类中,载流子不仅仅丢失相位记忆,而且丢失自旋记忆,如由磁性杂质引起的自旋翻转的退相干过程,核自旋涨落导致的退相干过程等属于这一类,它们被称为自旋退相干. 在理论上,可以通过 Büttiker 虚拟导线的方法来模拟这些退相干过程^[11]. 该方法的关键是在具有退相干的区域接上虚拟导线. 载流子从退相干区域流进虚拟导线,丢失相位记忆后再回到退相干区域. 在整个过程中,虚拟导线中的静电流为零,而体系的相位相干则被破坏.

2 物理模型和研究方法

最近,我们研究了退相干对量子自旋霍尔效应的影响^[12]. 我们的研究集中在以下两个问题:(1)体系中的退相干是如何影响实验上所观测到的量子化纵向电导平台;(2)是否存在新的可观测物理量,它们能够在宏观尺度的样品中,依然保持量子化平台的特性,从而能更好地反映量子自旋霍尔效应的本质. 为了与实验结果进行对比,我们考虑与实验装置相同的六端口体系(见图 1(a)),体系哈密顿量 H 可以写为

$$H = H_{\text{QSHE}} + H_{\text{virtual-lead}} + H_{\text{couple}},$$

其中 H_{QSHE} 为量子自旋霍尔效应样品的哈密顿量. H_{QSHE} 的表述形式并不唯一,它和所选用的计算模型有关. 选用的模型可以是最简单的理想模型^[12],也可以是具体材料模型,例如,铁磁的石墨烯模型^[13],HgTe/CdTe 量子阱模型^[14]. 无论选用哪种模型,本文的主要计算结果都完全相同. 为了方便,下文只给出 HgTe/CdTe 量子阱模型的计算结果. $H_{\text{virtual-lead}}$ 为 Büttiker 虚拟导线的哈密顿量,为了模拟退相干,退相干区域每个格点都需要接上与轨道数相同的虚拟导线. H_{couple} 为虚拟导线与量子自旋霍尔体系的耦合项.

利用 Landauer-Büttiker 电流公式结合非平衡

格林函数方法,我们可以计算每根实导线和虚拟导线上的电流(具体计算公式见文献[12]).然后我们分析这些导线的端口条件.图1(a)中的1和4端口为电压端,我们在这两端口加上一小电压 V ,从而导致在纵向有一电流 I_{14} .对于普通退相干,载流子在进入虚拟导线并从虚拟导线返回的过程中,仅仅丢失相位记忆而保留自旋记忆.因此,任何一个格点 i 的虚拟导线电流均满足 $J_{i\uparrow}=J_{i\downarrow}=0$,这时 $V_{i\uparrow}$ 一般不等于 $V_{i\downarrow}$.对于自旋退相干,我们通过使每根虚拟导线满足 $V_{i\uparrow}=V_{i\downarrow}$, $J_{i\uparrow}+J_{i\downarrow}=0$,来达到载流子既丢失相位记忆,也丢失自旋记忆的要求.如果横向4个端口作为电压探测端,端口条件满足总电流为零,即 $J_{p\uparrow}+J_{p\downarrow}=0$,并且自旋压 $V_{p\uparrow}=V_{p\downarrow}=V_p$ ($p=2,3,5,6$).这时就可以定义纵向电阻 $R_{14,23}=\frac{V_2-V_3}{I_{14}}$,该纵向电阻与文献[6]中实验测量的纵向电阻完全相同.我们也考虑了横向4个端口为自旋压探测端的情形,这时每个端口的条件是 $J_{p\uparrow}=J_{p\downarrow}=0$;在这种情况下,我们可以定义自旋霍尔电阻 $R_s=\frac{V_{p\uparrow}-V_{p\downarrow}}{I_{14}}$ (即横向任一端口的自旋压差除以纵向电流).利用Landauer-Büttiker公式,并结合各导线的端口条件,就可以得到每根实导线上的电压与电流,然后纵向电阻 $R_{14,23}$ 和自旋霍尔电阻 R_s 也可获得.

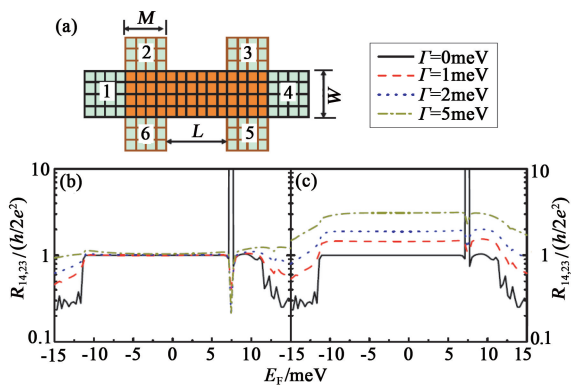


图1 (a)是一个六端的自旋霍尔装置的示意图;(b)和(c)显示纵向电阻 $R_{14,23}$ 与费米能级 E_F 的关系,不同曲线对应于不同的退相干强度 Γ (b)为普通退相干,(c)为自旋退相干.样品尺寸为 $L=200\text{nm}$, $W=200\text{nm}$, $M=200\text{nm}$.其他参数为HgTe/CdTe量子阱实际参数[14],其中体带隙为 $\Delta=-20\text{meV}$

3 数值结果及讨论

我们首先研究退相干对纵向电阻的影响.图1(b)和1(c)分别给出了在普通退相干和自旋退相干情况下纵向电阻 $R_{14,23}$ 随着费米能 E_F 的变化关系.在没

有退相干的情况下,纵向电阻表现出量子化平台.当有退相干存在时,量子化平台是否能保持还与退相干类型有关:对于普通退相干, $R_{14,23}$ 的平台能够很好保持,即使在很大的退相干强度 Γ 下,平台值改变也很小(见图1(b)),基本维持在量子化平台值 $\frac{h}{2e^2}$ 上;但对于自旋退相干,尽管 $R_{14,23}$ 还能保持平台的样子,但它的平台值大大偏离了量子化平台值 $\frac{h}{2e^2}$,即便在自旋退相干 Γ 很小的情况下,这个偏离量也非常大.我们分析了这个现象背后的物理机制:对普通退相干来说,载流子保持了自旋记忆,背散射仅仅发生在载流子从样品的一条边界散射到与此样品边界相对的另一边界时.因此除非样品非常窄,通常情况下的背散射都非常弱,从而使量子化平台能够很好地保持;但对自旋退相干来说,载流子的自旋可以翻转,背散射可以在样品的同一条边界发生,所以纵向电阻 $R_{14,23}$ 受到剧烈影响并严重偏离量子化平台值.在一个真实的实验体系中,因为磁性杂质、核自旋涨落等存在,自旋退相干就会不可避免地发生.当样品尺寸大于自旋退相干长度时,自旋退相干对输运性质的影响将不能被忽略,因此量子化纵向电阻平台只能在介观样品中存在.这就解释了为什么在实验中对于宏观样品总观测不到量子化的纵向电阻平台.而且,通过数值模拟,我们还可以定量地获得实验上所观测到的纵向电阻 $R_{14,23}$ 的所有特性.

下面我们研究在量子自旋霍尔效应体系中是否有比纵向电阻 $R_{14,23}$ 更能很好反映其拓扑性质的物理量.首先我们比较量子霍尔效应与量子自旋霍尔效应的输运测量结果.在量子霍尔效应六端口输运测量中,霍尔电阻表现出量子化平台,该量子化平台几乎不受任何散射和任何退相干的影响[15].在量子自旋霍尔效应中,每条边上的自旋电压差类似于霍尔电压,如果我们定义自旋霍尔电阻 $R_s=\frac{V_{p\uparrow}-V_{p\downarrow}}{I_{14}}$,它的物理性质应当类似于量子霍尔效应中的霍尔电阻.图2(b)和图2(c)描述自旋霍尔电阻 R_s 在两种退相干情况下随着费米能级 E_F 的变化.无论是自旋退相干还是普通退相干, R_s 都会表现出量子化的平台.例如,当 $E=0$ 和 $\Gamma=5\text{meV}$ 时,纵向电阻 $R_{14,23}$ 的改变量超过210%(见图1(c)),而自旋霍尔电阻 R_s 在自旋退相干(见图2(c))和普通退相干(见图2(d))情况下改变量均不超过0.3%,由此我们认为, R_s 的量子化平台在很强的退相干下仍然可以保持. R_s 对各种退相干的非敏感性与量

子霍尔效应中霍尔电阻对各种退相干非敏感性的物理本质完全类似. 借助自旋压沿着某一条边缘的分布图(见图2(a)与图2(b)), 我们可以得到有关 R_s 对各种退相干的非敏感性的物理本质的直观图像. 在左右导线, 自旋压为自旋不相关的, 并且有 $V_{1\sigma} = -V_{4\sigma} = V$ (σ 表示自旋向上或自旋向下); 在中心区, 自旋压 $V_{p\sigma}$ 是自旋相关的. 在没有退相干时, 自旋向上的载流子无耗散地从左往右流, 而自旋向下的载流子无耗散地从右向左流(2,3 端口), 所以有 $V_{p\uparrow} = -V_{p\downarrow} = V$ (见图2(a)). 当体系存在自旋退相干时, 由于背散射效应, 部分原自旋压为 $V_{p\uparrow}$ 通道的载流子会被散射到自旋压为 $V_{p\downarrow}$ 的通道, 从而使得自旋压差 $V_{p\uparrow} - V_{p\downarrow}$ 减小(见图2(b)), 与此同时, 向右运动通道上的载流子被散射到相对的向左运动通道, 纵向电流 I_{14} 会相应地减小. 这种自旋压差 $V_{p\uparrow} - V_{p\downarrow}$ 与纵向电流 I_{14} 的补偿效应使得即便存在强自旋退相干情况下自旋霍尔电阻 R_s 平台还依然保持不变. R_s 对各种退相干的非敏感性意味着在宏观尺度样品中观测到量子化的 R_s 平台是可行的.

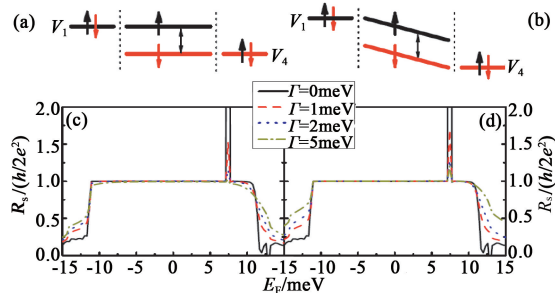


图2 (a)和(b)分别为不存在自旋退相干(a)与存在自旋退相干(b)情况下自旋压 $V_{p\sigma}$ 沿着某一条边界示意图, 黑色实线与箭头表示自旋向上, 红色实线与箭头表示自旋向下. (c)和(d)为自旋霍尔电阻 R_s 与费米能级 E_F 的关系, 其中(c)为普通退相干, (d)为自旋退相干

4 结束语

在本文中, 我们研究了退相干对量子自旋霍尔效应的影响. 由于自旋退相干效应, 原来理论预测的量子自旋霍尔效应的标志——纵向量子化电阻平台只在介观尺度的样品中存在, 从而解释了最近量子自旋霍尔效应输运实验的测量结果. 同时, 我们找到对任何退相干都不敏感的新物理量——自旋霍尔电阻. 它的量子化平台能在宏观样品中观测到, 从而能更好地反映量子自旋霍尔效应的拓扑性质.

参考文献

[1] Hansan M Z, Kane C L. Rev. Mod. Phys. ,2010,82:3045
[2] Qi X L, Zhang S C. arXiv:1008.2026v1; Qi X L, Zhang S C. Physics Today, 2010, 63(1):33
[3] Klitzing K V, Dorda G, Pepper M. Phys. Rev. Lett. ,1980,45:494
[4] Kane C L, Mele E J. Phys. Rev. Lett. ,2005,95:226801
[5] Bernevig B A, Hughes T L, Zhang S C. Science, 2006, 314:1757
[6] Konig M, Wiedmann S *et al.* Science, 2007, 318:766
[7] Fu L, Kane C L, Mele E J. Phys. Rev. Lett. ,2007,98:106803
[8] Hsieh D, Qiao D *et al.* Nature(London), 2008, 452:970
[9] Kohmoto M, Annals of Physics, 1985, 160:343
[10] Kane C L, Mele E J. Phys. Rev. Lett. ,2005,95:146802
[11] Büttiker M. Phys. Rev. B, 1986, 33:3020
[12] Jiang H, Cheng S G, Sun Q F, Xie X C. Phys. Rev. Lett. , 2009, 103:036803
[13] Zhang H, Jiang H, Xie X C, Sun Q F. Phys. Rev. B, 2011, 83:115402
[14] Jiang H, Wang L, Sun Q F, Xie X C. Phys. Rev. B, 2009, 80: 165316
[15] Edited by Datta. Chapter 4, Electronic Transport in Mesoscopic System. Cambridge, U. K. : Cambridge University Press, 1995