

量子自旋霍尔效应

范翔 00904097

2012 年 5 月 24 日

摘要 量子自旋霍尔态是一种拓扑绝缘体，是一种全新的物质状态。最近，实验上也在 HgTe 量子阱中实际观测到了量子自旋霍尔效应。量子自旋霍尔效应具有许多深刻的性质，并且应用前景十分辽阔。

简介

我对量子自旋霍尔效应的概念概括如下：在特定的量子阱中，在无外磁场的条件下（即保持时间反演对称性的条件下），特定材料制成的绝缘体的表面会产生特殊的边缘态，使得该绝缘体的边缘可以导电，并且这种边缘态电流的方向与电子的自旋方向完全相关。它最初由 Kane 和 Mele 在理论上预言 [1]，最近实验上在 HgTe 量子阱中被真正观测到 [2]。

量子自旋霍尔态是一种全新的物质状态。凝聚态理论通常根据对称性破缺原理来对物质状态进行分类。量子自旋霍尔态和量子霍尔态是属于无自发对称性破缺的物质状态，与普通物质状态大为不同。而量子自旋霍尔态与量子霍尔态的不同之处就在于，它不需要外加磁场，因此还保持了时间反演对称性。

拓扑绝缘体简介

为了说清楚量子自旋霍尔态，需要先讲一下拓扑绝缘体的概念。拓扑绝缘体是指满足这样一种性质的材料：材料的内部是绝缘体，然而他却可以允许电流在其表面上流动。也就是说，拓扑绝缘体作为体材料是绝缘体，然而它的表面是导体。这是因为拓扑绝缘体的能带结构非常特殊，如图 1：在导体内部，如同通常的绝缘体一样，费米能级在导带和价带之间；然而，在拓扑绝缘体的表面上，存在着特殊的量子态，这些量子态位于材料能带结构的带隙之中，从而允许导电，见图 1 中的两条连接了导带价带的绿线。这些特殊的量子态可以用拓扑不变量（例如 Z_2 拓扑不变量）来表征 [3]，它类似于数学中拓扑学里的亏格，是一种拓扑序。因为这样一种状态是受到了拓扑上的保

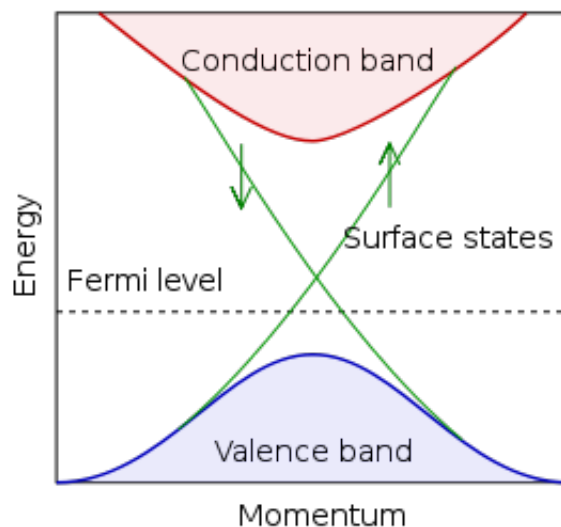


图 1: 拓扑绝缘体的能带结构图 [4]

护，所以它并不受杂质或者几何上的扰动所影响，表现出了一种鲁棒性。

量子自旋霍尔态就是一种拓扑绝缘体，它主要是利用了自旋-轨道耦合效应。

一维情况的直观理解

为了更好地理解量子自旋霍尔效应，我们先从一维的情况说起。在一维的世界里，只有两个方向的运动：向前和向后。在通常的材料中，电子在运动时会被散射，这种随机的散射会导致这两种方向的运动互相转化，而这导致了电阻的产生。用日常生活中的一个例子可以进行类比：如果一条马路上的车既有向前的也有向后的，那将会导致这条路拥堵不堪；然而如果分成两个车道，一边只能向前开，一边只能向后开，

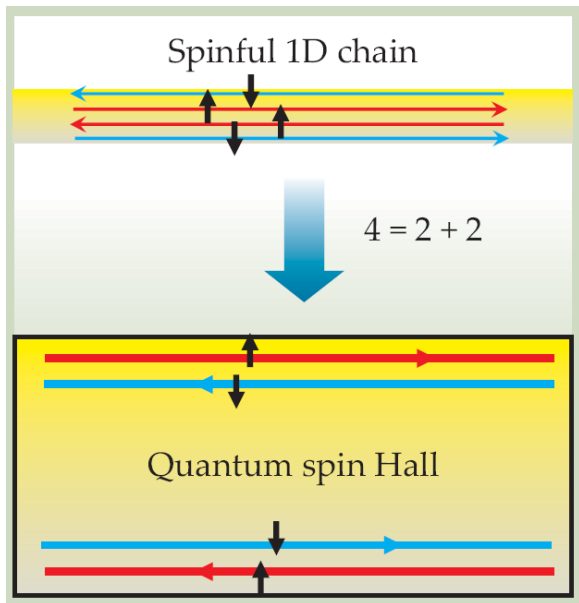


图 2: 量子自旋霍尔效应一维情况示意图 [5]

那么道路将变得畅通无阻。如果通过巧妙的设计，让电子在一个边缘只能朝一个方向运动，那就可以有效地避免散射或者碰撞，进而大大减小电阻。量子自旋霍尔效应与之类似，如图 2（黑色箭头代表自旋方向，蓝色、红色的箭头代表运动方向）。在考虑自旋的一维系统中，电子可以分为自旋向上、自旋向下，向左运动、向右运动，一共四种。量子自旋霍尔效应实现了这样一个效果：在上边缘，自旋向上的电子只能向右运动，自旋向下的电子只能向左运动；下边缘正好与之相反。

想要在某个边缘上，特定自旋方向的电子只能朝一个方向运动，就需要让散射后运动方向反向的概率为零。如何实现呢？其实可以类比于增透膜是如何实现反射率为零的：两个界面反射出的光波恰好相位相反，相干叠加后就抵消掉了。量子自旋霍尔效应与之类似。当一个电子处在量子自旋霍尔边缘态的时候，如果碰到了杂质，它有顺时针、逆时针两种方式绕着杂质旋转然后最终反向，如图 3 所示。顺时针和逆时针的旋转对应于电子旋转了 $-\pi$ 和 π ，二者相差 2π ，并且这两种旋转方式等概率地发生。在量子力学中，有一个非常深刻而神奇的现象，就是对于自旋 $\frac{1}{2}$ 的粒子（例如电子），当它旋转 2π 的时候，波函数并不是不变，而是会相差一个负号！因此通过顺时针和逆时针旋转然后运动反向的电子，波函数相干叠加之后恰好为零。这就保证了电子不会被散射成反向运动，即

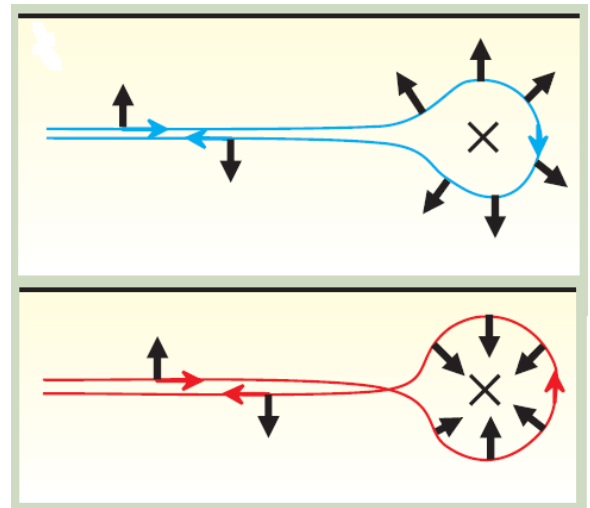


图 3: 散射后运动方向相反的概率为零原理图 [5]

它们只能朝一个方向运动。

二维情况简介

二维情况的量子自旋霍尔态可以在 HgTe 量子阱中实现，如图 4。

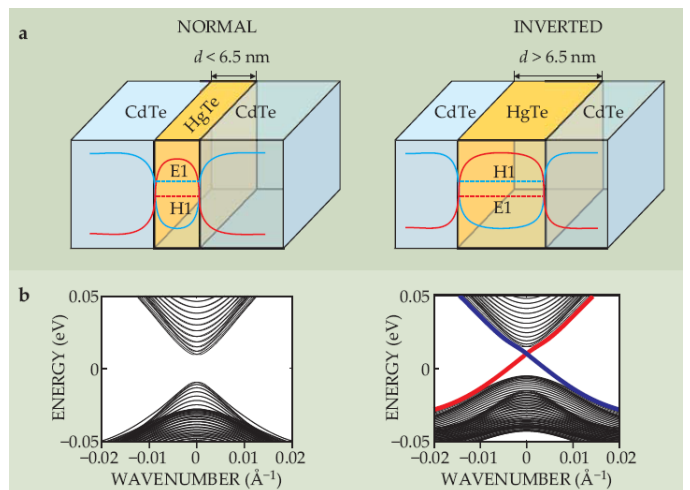


图 4: 量子自旋霍尔效应二维情况示意图 [5]

在通常的半导体中，导带是由 s 轨道的电子形成的，价带是由 p 轨道的电子形成的。但是在特定的元素中，例如 Hg、Te，自旋-轨道耦合效应是如此的显著，以至于把 p 轨道推到了 s 轨道的上面，于是形成了能带的反转。可以把 HgTe 与 CdTe 做成三明治的形状，这样一来，通过调节 HgTe 层的厚度 d_{QW} ，就

可以调节整体自旋-轨道耦合的强度， d_{QW} 越大自旋-轨道耦合的作用越强。能带反转的临界厚度 d_c 约为 6.5nm。

在 HgTe 量子阱中的量子自旋霍尔效应可以用关于 E1、H1 子能带的模型来描述。如图 4a，当 $d_{QW} > d_c$ 时，H1 子能带高于 E1 子能带，理论计算出在能带反转区域会出现一对边缘态；当 $d_{QW} < d_c$ 则不会发生。这对边缘态携带着不同自旋的电子，从价带扩散到导带。注意图 4b 中的第二幅能带结构图与拓扑绝缘体的能带结构图（图 1）是一致的。

HeTe/CdTe 量子阱中量子自旋霍尔效应的理论模型

二维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。基于一些基本的假设，二维 HgTe 拓扑绝缘体可以被这样一个哈密顿量描述：

$$H(\mathbf{k}) = \epsilon(k)\mathbf{1} + \begin{pmatrix} M(k) & A(k_x + ik_y) & 0 & 0 \\ A(k_x - ik_y) & -M(k) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M(k) & -A(k_x - ik_y) \\ 0 & 0 & -A(k_x + ik_y) & -M(k) \end{pmatrix} \quad (1)$$

其中 $\epsilon(k) = C + Dk^2$ ， $M(k) = M - Bk^2$ 。在这个哈密顿量中：左上角的 2*2 矩阵块描述了自旋向上的、类 s 轨道的 E1 导带中的以及类 p 轨道的 H1 价带中的电子；右下角的 2*2 矩阵块描述了自旋向下的那些能带中的电子。 $\epsilon(k)\mathbf{1}$ 项只是一个对所有能带都起作用的无关紧要的量。这些能带之间的能隙为 $2M$ ， B （通常是负值）描述了能带的曲率。当 $M/B < 0$ 时，这个模型解出的本征态描述了普通的绝缘体；然而在厚量子阱的情况下，能带发生反转， M 变成了负值，此时这个模型的解给出了量子自旋霍尔绝缘体的边缘态的描述。

由此哈密顿量解得的两个边缘态波函数 $\psi_s(j)$ 和对应能量本征值 $E_s(k_x)$ 为

$$\psi_s(j) = \sum_s (\lambda_{(1)}^j - \lambda_{(2)}^j) \phi_{s+} \quad (2)$$

$$E_s(k_x) = -As \sin(k_x) \quad (3)$$

其中

$$\lambda_{(1,2)} = \frac{-m(k, M) \pm \sqrt{m(k, M)^2 + (A^2 - 4B^2)}}{A + 2B}$$

$$m(k, M) = -2B(2 - M/2B - \cos(k_x))$$

从上面的表达式可以看出，两个拥有不同 Γ^1 本征值的边缘态是在不同方向上传播的。

螺旋液体的拓扑性质的理论

量子自旋霍尔系统可以通过研究边缘态的低能等效理论来理解。这个理论的哈密顿量可以写为

$$H = \int \frac{dk}{2\pi} (\psi_{k+}^\dagger v k \psi_{k+} - \psi_{k-}^\dagger v k \psi_{k-}) + H_{pert} \quad (4)$$

其中 H_{pert} 代表可能的扰动项。

定义“手性”算符

$$C = N_+ - N_- = \int \frac{dk}{2\pi} (\psi_{k+}^\dagger \psi_{k+} - \psi_{k-}^\dagger \psi_{k-}) \quad (5)$$

那么如果一个算符把 C 的值改变了 $2(2n-1)(n \in \mathbb{Z})$ ，那么这个算符是时间反演的。也就是说，时间反演对称性要求哈密顿量的扰动项 H_{pert} 只包含 $2n$ 个粒子的反弹，例如 $\psi_{k+}^\dagger \psi_{k'++} \psi_{p-} \psi_{p'-}$ 。因此，金属中常见的扰动，例如 $\psi_{k+}^\dagger \psi_{k'-}$ ，是被时间反演对称性所禁止的。这对于边缘态的拓扑稳定性是必须的。其实这就是前面提到的图 3 那种直观理解的理论基础。这种边缘态的等效理论和以往的所有理论模型都有定性上的不同，研究人员把这种理论描述的对象称为“螺旋液体”（Helical Liquid）。

为了下面的叙述，在这里需要说一下 Kramer's Pair 的概念。理论表明，任何时间反演对称的自旋 1/2 的系统，其本征态总是至少有二重简并，这简并的两个态就称为 Kramer's Pair。前面的直观理解部分其实已经为 Kramer's Pair 做好了铺垫：图 2 的 Quantum spin Hall 部分中，上边缘的红线和蓝线就是一个 Kramer's Pair，下边缘又是另外一个 Kramer's Pair。上面一段其实说的就是，如果一个边界上只存在 1 个 Kramer's Pair，那么时间反演对称性就保证了电子不会从这个 Pair 中的一个态跳到另一个态上，从而保证了没有反弹。

现在再来考虑在边界上有两个 Kramer's Pair 的情况，例如在一维情况下，有两个向右运动的通道两个向左运动的通道，这时的哈密顿量写为

$$H = \int \frac{dk}{2\pi} \sum_{s=1,2} (\psi_{ks+}^\dagger v_s k \psi_{ks+} - \psi_{ks-}^\dagger v_s k \psi_{ks-}) \quad (6)$$

与只有 1 个 Kramer's Pair 时类似，一个态上的电子不会跃迁到同一个 Kramer's Pair 上的另一个态上。

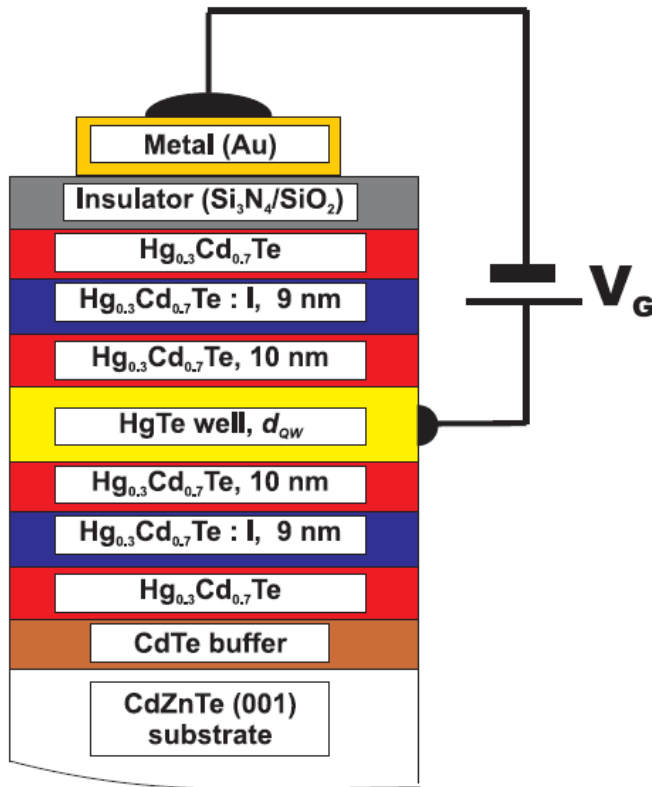


图 5: 量子阱层级结构示意图 [2]

但是，此时电子可以跃迁到另外一个 Kramer's Pair 中的态上，例如 $\psi_{k1+}^\dagger \psi_{-k,2-}$ ，这种跃迁的概率不再是 0。此时将不再能保证无反弹，因此此时就退化成了普通的绝缘体了。

更普遍的，对于一个具有时间反演对称性的边缘系统：如果有奇数个 Kramer's Pair，那么它是量子自旋霍尔态；如果有偶数个 Kramer's Pair，那么它是普通绝缘体。这样的一个性质就让人们很自然地想到用 Z_2 拓扑量子数来描述量子自旋霍尔系统。 Z_2 拓扑不变量的含义其实就是它的取值只能为 0 和 1 的拓扑不变量。

实验观测

实验上，粗略来说就是要实现图 4a，实际测量用的量子阱层级结构如图 5 所示。样品是用分子束外延法生长出来的。

边缘态的特点使得实验上可以很明确地区分量子自旋霍尔绝缘体和普通绝缘体。量子自旋霍尔绝缘体的两个边缘态表现得像是两个一维通道，各自贡献一

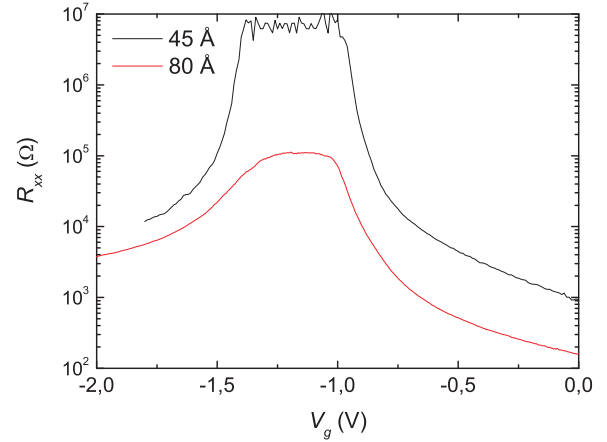


图 6: 实验结果对比图 [2]

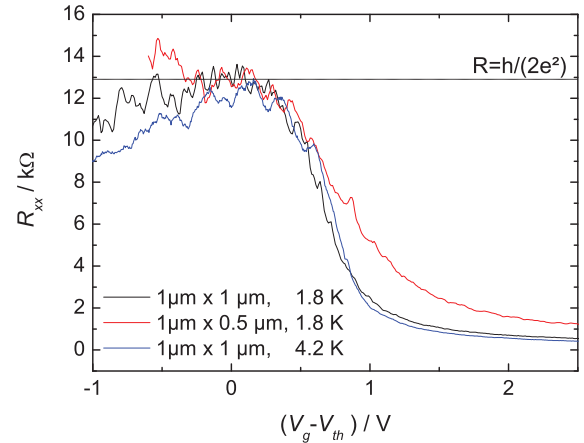


图 7: 不同 d_{QW} 的实验结果图 [2]

个量子的电导（即 e^2/h ），因此其电阻应当是 $h/2e^2$ 。与此相反，普通的绝缘体的电阻应当是无穷大。对于不同厚度（ d_{QW} 大于和小于临界厚度 d_c ）的 HgTe 量子阱，实验上确实观测到了电阻的巨大差别，如图 6：红线代表量子自旋霍尔绝缘体，黑线代表普通绝缘体。

图 7 的结果更进一步地证实了量子自旋霍尔态的电子输运确实只发生在材料的表面。红线和黑线是在不同尺寸的装置中测得的电阻，可以看出：在图片靠右部分的导体阶段（体导电），两个装置的电阻明显不同；然而在图片靠左部分的绝缘体阶段，两个不同尺寸的装置表现出了相同的电阻（而且这个阻值都是

$h/2e^2$), 这就证明了在此阶段一定是表面导电而不是体导电。

另外, 通过蓝线和黑线的对比可以看出, 温度的升高对电阻几乎没有影响, 只要 $k_B T$ 远小于能隙。这就显示出了它作为拓扑绝缘体的鲁棒性。

应用及意义

按照对称性破缺的分类方法, 量子自旋霍尔态是一种全新的物质状态, 这本身的意义就十分重大。

在拓扑绝缘体中, 有许多新的物理现象被预言, 例如分数电荷、自旋电荷分离、轴子、马约拉纳费米子等等。因此, 量子自旋霍尔效应和拓扑绝缘体的领域正变得非常热, 吸引着大量的科学家投身研究。

量子自旋霍尔效应可以实现对自旋的操纵, 再加上拓扑绝缘体的鲁棒性, 因此量子自旋霍尔态的材料被认为可以用来实现量子计算。

“爱因斯坦坚持, 所有基本的物理定律都应该用几何的语言去表述。而现在的物理学家正追寻着比爱因斯坦更进一步的梦想, 正在探索用拓扑场论去表述基本的物理定律。” [5] 在我看来, 拓扑性质是比几何性质更基本的数学性质, 因此最基本的物理定律也许的确需要用拓扑的理论框架来描述。

参考文献

- [1] C. L. Kane and E. J. Mele. Quantum spin hall effect in graphene. *Physical Review Letters*, 95(22):226801, November 2005.
- [2] Markus Koenig, Hartmut Buhmann, Laurens W Molenkamp, Taylor L Hughes, Chao-Xing Liu, Xiao-Liang Qi, and Shou-Cheng Zhang. The quantum spin hall effect: Theory and experiment. *arXiv:0801.0901*, January 2008.
- [3] C. L. Kane and E. J. Mele. Z_2 topological order and the quantum spin hall effect. *Physical Review Letters*, 95(14):146802, 2005.
- [4] Wikipedia contributors. Topological insulator, May 2012. Page Version ID: 483273690.

- [5] X. L Qi and S. C Zhang. The quantum spin hall effect and topological insulators. *Physics Today*, 63(1):33–38, 2010.
- [6] Wikipedia contributors. Quantum spin hall effect, October 2011. Page Version ID: 456466445.
- [7] B. Andrei Bernevig and Shou-Cheng Zhang. Quantum spin hall effect. *Physical Review Letters*, 96(10):106802, March 2006.