

doi:10.3788/gzxb20134205.0564

磁诱导三维拓扑绝缘体波导中的导模

徐 谊, 何 英, 杨 艳 芳

(上海大学 理学院 物理系, 上海 200444)

摘 要:在三维拓扑绝缘体表面上外加铁磁条形成的磁势垒量子阱,通过控制入射电子能量,使得入射电子波限制在势阱中传播,并由波函数的连续性求得磁诱导三维拓扑绝缘体波导的色散方程.由于此方程是超越方程,不能解析求解,因此本文采用图解法求解色散方程的解.研究表明:在入射电子能量大于磁势垒和小于磁势垒的情况下,都能够形成波导;当入射电子的能量大于磁势垒时,波导能够支持基模,而且模式阶数也依次递增;而当入射电子能量小于磁势垒时,波导能够承载的导模数量有所减少.通过研究波导中导模几率密度的空间分布,发现三维拓扑绝缘体表面上磁场诱导的电子波导能够很好地束缚电子,而且低阶模对电子的束缚能力强于高阶模.此外,本文也推导出了波导的几率流密度分布的公式.

关键词:拓扑绝缘体;波导;导模;图解法

中图分类号:O463+.1;O469

文献标识码:A

文章编号:1004-4213(2013)05-0564-6

Guide Modes in Three-dimensional Topological Insulator Waveguide Induced by Magnetic Fields

XU Yi, HE Ying, YANG Yan-fang

(Department of Physics, College of Science, Shanghai University, Shanghai 200444, China)

Abstract: A magnetic quantum well created by putting two ferromagnetic metal stripes on the three-dimensional topological insulator is investigated. The incident electron waves are confined in the quantum well by controlling the incident energy. The dispersion equation of the waveguide is obtained with the continuity of the wave functions. The graphical method is applied to solve this equation since it is a transcendental equation, of which the solution can not be obtained with analytic method. Whether the energy of the incident electrons is higher than the magnetic barrier or not, the electron waveguide can be formed. The waveguide supports the fundamental mode for the higher incident electron energy. The order of the modes increases with the increasing electron energy. The number of the guided modes decreases for the lower incident electron energy. The probability density of spatial distribution is studied. It shows that the three-dimensional topological insulator waveguide induced by magnetic fields can confine electrons well and the lower guided modes can confine electrons better than the higher guided modes. Moreover, the function of the probability current density distribution in the waveguide is also presented.

Key words: Topological insulator; Waveguide; Guided modes; Graphical method

0 引言

传统上固态材料按照其导电性可以分为导体、

半导体以及绝缘体.最近,一种新的绝缘体——拓扑绝缘体(Topological Insulator, TI)^[1-3],引起了科学家们的广泛关注.拓扑绝缘体首先被预言存在于

基金项目:国家自然科学基金(Nos. 11204170, 61108010)和上海市自然科学基金(No. 11ZR1412300)资助

第一作者:徐谊(1989—),男,硕士研究生,主要研究方向为石墨烯波导传输性质. Email: xuyi19891205@shu.edu.cn

导师(通讯作者):何英(1976—),女,硕士生导师,博士,主要研究方向为石墨烯波导传输性质. Email: heyings@staff.shu.edu.cn

收稿日期:2012-09-30;录用日期:2012-12-25

HgTe 量子阱中^[4],随后被实验证实这是一个二维自旋霍尔绝缘体^[5]. $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ 合金^[6]是首先被发现的三维拓扑绝缘体.

三维拓扑绝缘体表面上的电子可以通过外加的电磁场来调控^[6-12]. 本文主要研究在三维拓扑绝缘体表面上外加磁场来限制拓扑绝缘体表面上电子的运动,形成类似光波导的结构. 众所周知,粒子具有波粒二象性,固体中的电子与光波一样表现出相似的波动性. 基于电子的波动特性,获得类似光波导的结构是有可能的. 电子波导与光波导具有很大的相似性,满足一定的条件就可以发生全反射从而形成波导结构. 例如:半导体材料构成的量子阱结构可以视其为平板电子波导^[13];石墨烯上的静电势形成的量子阱结构也可以束缚电子的运动,形成一电子波导^[14]. 此外,在石墨烯上加电磁场,形成静电势和磁矢势共同作用的量子阱也能很好地束缚电子^[15]. 与石墨烯的能带色散关系类似,拓扑绝缘体中表面态和边缘态的能带色散关系是线性的. 这就使得在三维拓扑绝缘体表面上加磁场形成类似光波导的结构成为可能.

本文通过与光波导类比,利用磁场调制三维拓扑绝缘体表面电子的运动,形成电子波导. 利用图解法对磁场诱导的三维拓扑绝缘体波导中的导模进行详细研究. 研究了波导中导模的几率密度的空间分布,发现该波导能够很好地束缚电子. 此外,推导出了波导中导模的几率流密度分布函数.

1 模型

本文研究的是三维拓扑绝缘体(如 Bi_2Se_3) 表面外加磁场后的二维电子气,如图 1(a),在三维拓扑绝缘体表面上放置了两条平行的顺铁磁性磁条. 它们产

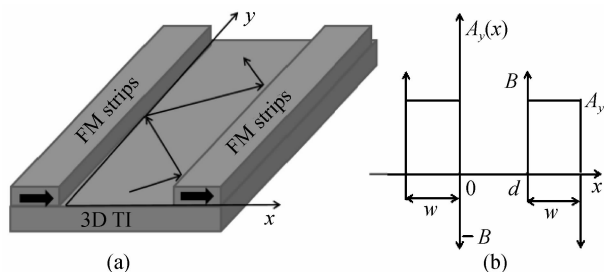


图 1 (a) 三维拓扑绝缘体磁诱导的波导结构示意图;(b) 对应图 1(a)的磁场及其产生的磁势垒

Fig. 1 (a) Structure of the waveguide induced by magnetic field in 3D TI; (b) The magnetic field and the magnetic barrier correspond to Fig. 1(a)

生垂直于拓扑绝缘体表面的 δ 函数形式的磁场为

$$B_z(x) = B[\delta(x+w) - \delta(x) + \delta(x-d) - \delta(x-d-w)] \quad (1)$$

式中, d 是两个铁磁条的间距, w 是铁磁条在 x 方向上的宽度. 在朗道规范下,其对应的磁矢势为

$$A_y(x) = \begin{cases} 0 & (0 < x < d) \\ A_y & (x \leq 0, x \geq d) \end{cases} \quad (2)$$

这样形成的磁势垒的形状如图 1(b). 在这样的模型中,如果势阱中的电子波能够在界面处总是发生全反射,那么就可以将电子束缚在势阱中,形成类似于光波导的电子波导.

2 色散方程

在所考虑的模型中,对于 Γ 点附近的低能级电子来说,描述电子运动的有效哈密顿量^[8-9]为

$$H = v_F \boldsymbol{\sigma} (\boldsymbol{\pi} \times \hat{z}) + V(x) + H_z \quad (3)$$

式中 v_F 是系统的费米速度, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ 是自旋泡利矩阵. $\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} + e\mathbf{A}(x)$, 其中 $\mathbf{A}(x)$ 是朗道规范下的磁矢势, $\mathbf{A}(x) = [0, A_y(x), 0]$. \hat{z} 是垂直于三维拓扑绝缘体表面的单位矢量. 在本文所研究的模型中,静电势为零,即: $V(x) = 0$. 式(3)中最后一项 $H_z = g\mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}$ 是由塞曼自旋分裂引起的. 由于在弱磁场下,塞曼效应对电子输运过程的影响很小,因此可以将此项略去^[8-9]. 因此,靠近 Γ 点的低能级电子的运动可以由式(4)来描述.

$$v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{\pi} \times \hat{z}) \Psi(x, y) = E \Psi(x, y) \quad (4)$$

式中, $\Psi(x, y) = [\phi_1(x, y), \phi_2(x, y)]^T$. $\phi_1(x, y)$, 和 $\phi_2(x, y)$ 是电子波函数的两个分量.

为了简便,引入两个特征量:磁场特征长度 $l_B = (\hbar/eB_0)^{1/2}$ 和特征能量 $E_0 = \hbar v_F/l_B$. 其他所有的量都将以这两个量为单位进行无量纲化处理. 对于典型的磁场强度 $B_0 = 0.1 \text{ T}$, 有 $l_B = 81.1 \text{ nm}$, $E_0 = 7.0 \text{ meV}$. 以特征长度为单位,有: $\mathbf{r} \rightarrow l_B \mathbf{r}$, $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}/l_B$; 以特征能量为单位,有 $A_y(x) \rightarrow B_0 l_B A_y(x)$, $E \rightarrow E_0 E$ 和 $V \rightarrow E_0 V$. 由于 y 方向的传播不变性,可将波函数表示成 $\phi_{1,2}(x, y) = \phi_{1,2}(x) e^{ik_y y}$ 的形式,代入方程(4)有

$$-\left(\frac{\partial}{\partial x} - k_y - A_y\right) \phi_1 = E \phi_2 \quad (5a)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} + k_y + A_y\right) \phi_2 = E \phi_1 \quad (5b)$$

由式(5a)和(5b)可得到一类亥姆霍兹方程

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_{1,2} - (k_y + A_y)^2 \phi_{1,2} + E^2 \phi_{1,2} = 0 \quad (6)$$

将式(6)与光学中的亥姆霍兹方程比较,可以发

现这里的电子波矢 E 与光学中的光波矢量处于相同的地位, $(k_y + A_y)$ 与光波导中的传播常量类似.

根据波导理论, 方程(6)的解为

$$\phi_1(x) = \begin{cases} Ae^{\alpha x} & (-\infty, 0) \\ B\cos(k_x x) + C\sin(k_x x) & (0, d) \\ De^{-\alpha(x-d)} & (d, +\infty) \end{cases} \quad (7)$$

将式(7)代入(5a)可得 $\varphi_2(x)$

$$\phi_2(x) = \begin{cases} \frac{k_y + A_y - \alpha}{E} Ae^{\alpha x} & (-\infty, 0) \\ B\sin(k_x x + \theta) - C\cos(k_x x + \theta) & (0, d) \\ \frac{k_y + A_y + \alpha}{E} De^{-\alpha(x-d)} & (d, +\infty) \end{cases} \quad (8)$$

式中, $(k_x, k_y) = E(\cos \theta, \sin \theta)$, E 是入射电子能量, θ 是入射角. 衰减常量 $\alpha = \sqrt{(k_y + A_y)^2 - E^2}$ 为一实数, 否则在势垒区便不存在消逝波. 可见, 要形成波导, 就需要满足条件: $|k_y + A_y| > |E|$.

由波函数 $\phi_1(x)$ 和 $\phi_2(x)$ 在 $x=0$ 和 $x=d$ 处的连续性可以得到相应的色散方程为

$$\frac{\alpha k_x \cos(k_x d)}{E} + \left[\frac{(k_y + A_y)k_y - E}{E} \right] \cdot \sin(k_x d) = 0 \quad (9)$$

方程(9)也可以写成

$$\tan(\xi) = F(\xi) =$$

$$\frac{\xi \sqrt{(\sqrt{(Ed)^2 - \xi^2} + A_y d)^2 - (Ed)^2}}{(Ed)^2 - (\sqrt{(Ed)^2 - \xi^2} + A_y d) \sqrt{(Ed)^2 - \xi^2}} \quad (10)$$

式中, $\xi = k_x d$. 由于方程(10)是一个超越方程, 无法得到解析解. 因此, 本文采用了光波导中常用的方法——图解法.

3 振荡导模

由色散方程(10)可以得到波导的能谱图, 如图2. 图中所取参量为 $d=1, A_y=10$. 图中边界线(点线)

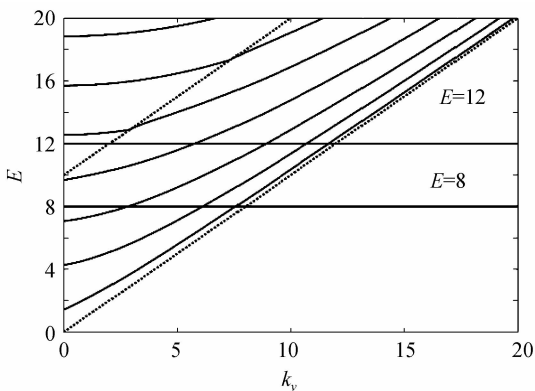


图2 波导的能谱曲线
Fig. 2 Energy spectrum for the waveguide

由 $k_y = E$ 和 $k_y + A_y = E$ 给出. 由图2可以看出, 不管入射电子能量大于还是小于磁势垒的高度, 只要满足一定条件, 就能得到导模. 当 $E=12 > A_y=10$ 时, 波导可以支持四个导模; 而当 $E=8 < A_y=10$ 时, 波导只能承载三个导模.

如图3所示, 实线表示 $\tan(\xi)$ 和 ξ 的关系, 虚线表示 $F(\xi)$ 和 ξ 的关系, 实线和虚线的交点给出了对应波导导模的 ξ 解, 图中交点的个数显示了波导中导模的存在个数. 将得到的一系列 ξ 值代入式(7)和(8)中, 就可以得到波函数 $\phi_1(x)$ 和 $\phi_2(x)$, 通过对波函数的分析就可以求得波导所支持的模式. 由图2可知, 在 $E > A_y$ 和 $E < A_y$ 的情况下, 都存在导模, 这里我们选取 $E=12$ 和 $E=8$, 其对应的色散曲线分别如图3(a)和(b). 可以看出, 图3(a)中有四个交点 ($\xi=2.7197, 5.4170, 8.0557, 10.5337$), 此时波导可以承载四个导模; 图3(b)中有三个交点 ($\xi=2.6070, 5.1587, 7.4942$), 波导中有三个导模. 这与图2中所得出的结论是一致的. 从图2也可以看出, 改变入射电子能量可以改变该波导所支持的模式数.

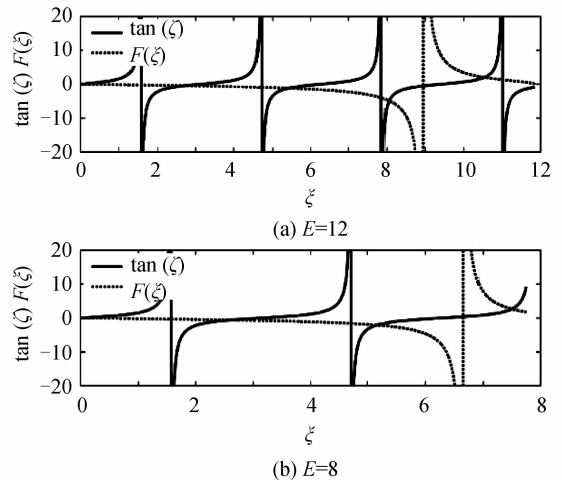


图3 有关 ξ 的振荡导模的图解法
Fig. 3 Graphical determination of ξ for guided modes

3.1 导模波函数

当 $E=12$ 时, 对应于图3(a)中四个交点的波函数如图4. 基于光波导理论, 本文定义波函数与坐标轴 x 的交点个数为导模的模式阶数. 由于波函数 ϕ_1 和 ϕ_2 有着相似的性质, 为了简洁, 本文仅讨论波函数 ϕ_1 . 从图4中可以清楚的看出, 波导能够支持基模、一阶模、二阶模、三阶模. 当然, 改变所取的物理参量, 可以得到更多的导模模式.

当 $E=8$ 时, 此时波导中所支持的导模的波函数如图5. 可以看出, 此时波导能够支持基模, 一阶模, 二阶模. 但与 $E=12$ 的情况相比, 此时波导能够承载的模式数目要少.

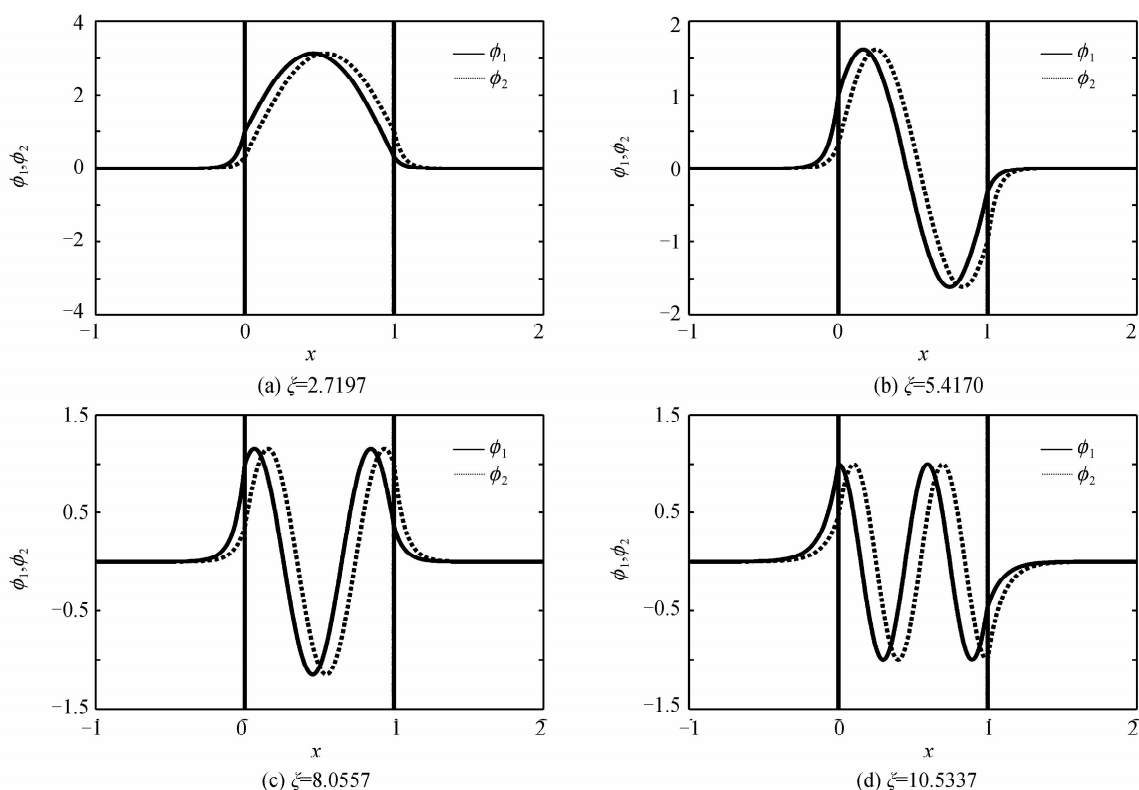


图 4 对应于图 3(a)中四个交点的振荡导模的波函数

Fig. 4 The wave functions of guided modes as a function of distance correspond to the four intersections in Fig. 3(a)

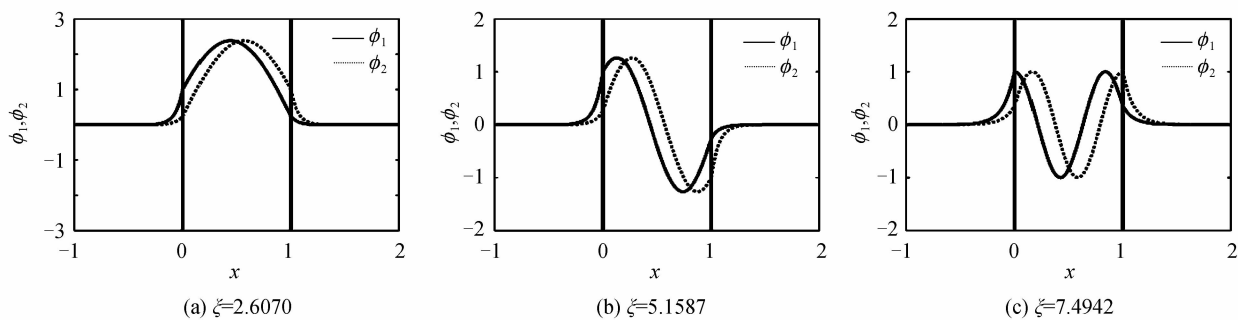


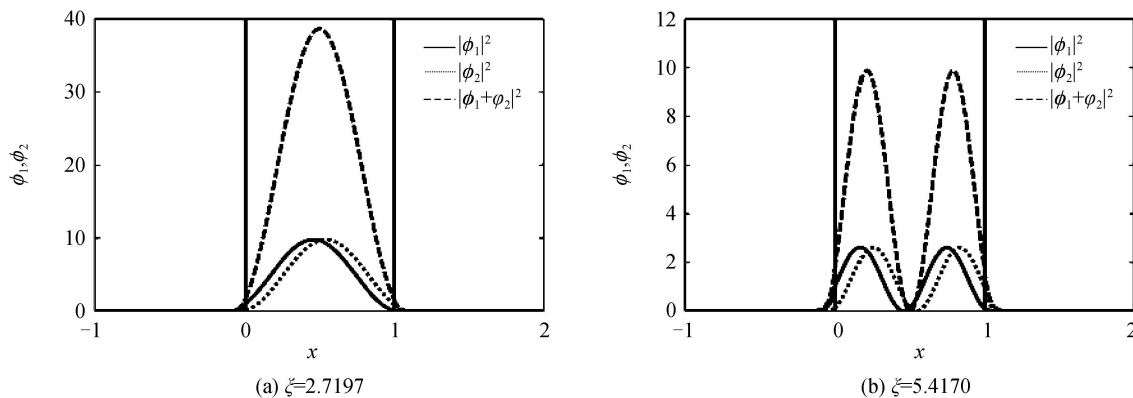
图 5 对应于图 3(b)中三个交点的振荡导模的波函数

Fig. 5 The wave functions of guided modes as a function of distance correspond to the three intersections in Fig. 3(a)

3.2 几率密度的空间分布

波导中几率密度的空间分布如图 6 和图 7, 分别对应图 4 和图 5 中的波函数. 由图 6 和图 7 可以看出, 磁场诱导的三维拓扑绝缘体波导能够很好地

束缚电子, 在波导通道之外产生的是消逝波. 同时也可以看出, 低阶模对电子的束缚能力里比高阶模强. 此外, $|\varphi_1 + \varphi_2|^2$ 对于通道中心位置 $x=0.5$ 是不对称的, 而 $|\varphi_{1,2}|^2$ 对于中心位置则是对称的.



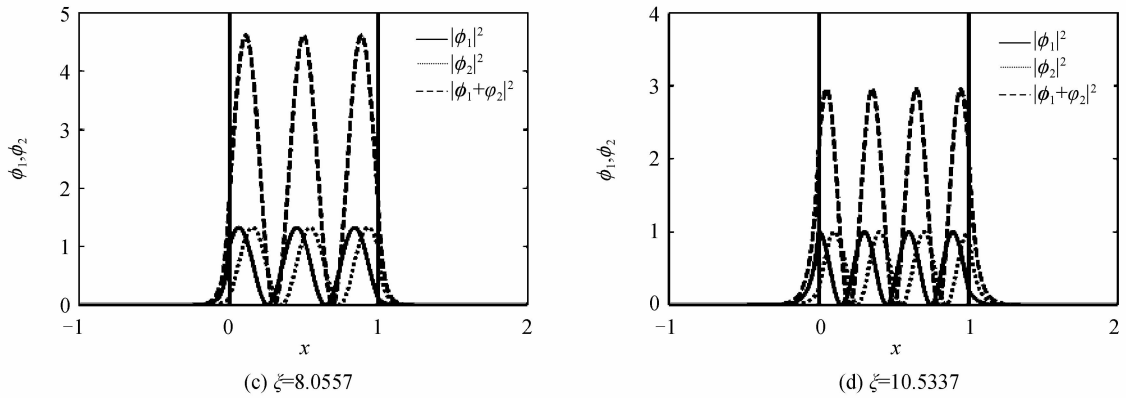


图 6 对应于图 4 中波函数的几率密度空间分布

Fig. 6 Spatial distribution of probability densities within the waveguide for the wave functions in Fig. 4

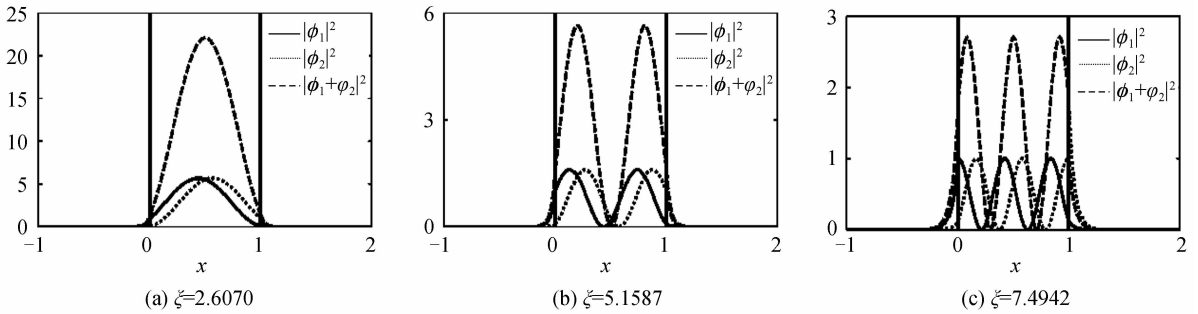


图 7 对应于图 5 中波函数的几率密度空间分布

Fig. 7 Spatial distribution of probability densities within the waveguide for the wave functions in Fig. 5

3.3 几率流密度

由式(3)可以得到,描述 Γ 点附近低能级电子运动的含时方程

$$(v_F/l_B)(-i\sigma_x \partial_y + i\sigma_y \partial_x + A_y \sigma_x) \Psi = i \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (11)$$

对式(11)取厄密共轭有

$$v_F/l_B (i\partial_y \Psi^\dagger \sigma_x - i\partial_x \Psi^\dagger \sigma_y + A_y \Psi^\dagger \sigma_x) = -i \frac{\partial \Psi^\dagger}{\partial t} \quad (12)$$

由 $\Psi^\dagger \times (11) - (12) \times \Psi$ 有

$$-[\partial_y (\Psi^\dagger \sigma_x \Psi) - \partial_x (\Psi^\dagger \sigma_y \Psi)] v_F/l_B = \frac{\partial (\Psi \Psi^\dagger)}{\partial t} \quad (13)$$

由 $\partial \rho / \partial t + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0$ 有 $J_y = (\Psi^\dagger \sigma_x \Psi) v_F/l_B$.

因此代入 ϕ_1 和 ϕ_2 可以得到不同区域内的 J_y .

$$J_y = \begin{cases} 2c_1 A^2 e^{2ax} v_F/l_B & (x < 0) \\ 2[B \cos(k_x x) + C \sin(k_x x)] \cdot [B \sin(k_x x + \theta) - C \cos(k_x x + \theta)] v_F/l_B & (0 < x < d) \\ 2c_2 D^2 e^{-2a(x-d)} v_F/l_B & (x > d) \end{cases} \quad (14)$$

式中: $c_1 = \frac{k_y + A_y - \alpha}{E}$, $c_2 = \frac{k_y + A_y + \alpha}{E}$.

系数 $ABCD$ 之间的关系为

$$\frac{A}{C} = \frac{B}{C} = \frac{\cos \theta - c_1}{\sin \theta}, \frac{D}{C} = \sin(k_x d) + \frac{\cos \theta - c_1}{\sin \theta}$$

4 结论

本文研究了磁场诱导的三维拓扑绝缘体的电子波导中的导模. 利用图解法分析了该波导中的各种导波模式的解. 结果表明, 不论入射电子能量大于还是小于磁矢势, 只要满足一定条件就能够形成波导. 当入射电子能量大于磁矢势时, 该波导能够支持基模、一阶模、二阶模和三阶模; 而当入射电子能量小于磁矢势时, 波导能够支持基模、一阶模和二阶模. 但是, 此时波导能够承载的导模数量减少. 通过研究该波导几率密度的空间分布, 发现该波导能够很好地束缚电子, 而且低阶模对电子的束缚能力高于高阶模. 此外, 我们还推导了波导各个区域中电子的几率流密度的分布函数. 磁诱导的三维拓扑绝缘体波导中导模的特性可能对制作基于三维拓扑绝缘体的电子器件有潜在的应用价值.

参考文献

[1] QI Xiao-liang, ZHANG Shou-cheng. The quantum spin hall effect and topological insulators[J]. *Physics Today*, 2010, **63** (1): 3-38.
 [2] HASAN M Z, KANE C L. Colloquium: Topological insulators[J]. *Reviews of Modern Physics*, 2010, **82** (4): 3045-3067.
 [3] QI Xiao-liang, ZHANG Shou-cheng. Topological insulators and superconductors[J]. *Reviews of Modern Physics*, 2011, **83** (4): 1057-1110.
 [4] BERNEVIG B A, HUGHES T L, ZHANG Shou-cheng.

- Quantum spin hall effect and topological phase transition in HgTe quantum wells[J]. *Science*, 2006, **314**(15): 1757-1761.
- [5] KÖNING M, WIEDMANN S, BRUNE C, *et al.* Quantum spin hall insulator state in HgTe quantum wells[J]. *Science*, 2007, **318**(2): 766-770.
- [6] FU Liang, KANE C L. Topological insulators with inversion symmetry[J]. *Physical Review B*, 2007, **76**(4): 045302.
- [7] CHANG Kai. Electrical control of electrons in topological insulators[J]. *Physics*, 2011, **40**(7): 458-461.
常凯. 拓扑绝缘体电子态的电场调控[J]. *物理*, 2010, **40**(7): 458-461.
- [8] WU Zhen-hua, PEETERS F M, CHANG Kai. Electron tunneling through double magnetic barriers on the surface of a topological insulator[J]. *Physics Review B*, 2010, **82**(11): 115211.
- [9] WU Zhen-hua, PEETERS F M, CHANG Kai. Spin and momentum filtering of electrons on the surface of a topological insulator[J]. *Applied Physics Letters*, 2011, **98**(16): 162101.
- [10] WANG Hai-yan, CHEN Xiong-wen, ZHOU Xiao-ying, *et al.* Electronic structure and transport on the surface of topological insulator attached to an electromagnetic superlattice[J]. *Physica B*, 2012, **407**(17): 3664-3670.
- [11] YOKOYAMA T, TANAKA Y, NAGAOSA N. Anomalous magnetoresistance of a two-dimensional ferromagnet/ferromagnet junction on the surface of a topological insulator[J]. *Physical Review B*, 2010, **81**(12): 2121401(R).
- [12] YOKOYAMA T, BALATSKY V A, NAGAOSA N. Gate-controlled one-dimensional channel on the surface of a 3D topological insulator[J]. *Physical Review Letter*, 2010, **104**(24): 246806.
- [13] GAYLORD T K, GLYTISIS E N, BRENNAN K F. Semiconductor quantum wells as electron wave slab waveguides[J]. *Journal of Applied Physics*, 2010, **66**(4): 1842-1848.
- [14] ZHANG Fan-ming, HE Ying, CHEN Xi. Guided modes in graphene waveguides[J]. *Applied Physics Letters*, 2009, **94**(21): 212105.
- [15] HE Ying, HUANG Wei-de. Guided modes in graphene waveguides with magnetic-electric barrier [J]. *Applied Physics A: Materials Science & Processing*, 2012, **106**(1): 41-46.